

Sanja Singer

Algoritmi za matrice sa
strukturuom
Predavanja

Zagreb, 2009.

1. Faktorizacija Choleskog

1.1. Uvod

Uvodni primjer u kolegij je dobro poznata faktorizacija Choleskog¹. Na tom jednostavnom primjeru pokazat ćemo kako se rade perturbacijska analiza i analiza grešaka zaokruživanja.

Faktorizacija Choleskog jedan je od osnovnih alata numeričke linearne algebre.

Prvo ćemo nizom jednostavnijih lema pokazati da za **hermitsku pozitivno-definitnu** matricu $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ postoji jedinstvena faktorizacija Choleskog (tekst je, uglavnom, rađen prema knjizi [4]).

Napomena 1.1. Prije samog prelaska na faktorizaciju Choleskog, treba se podsjetiti na dvije dobro poznate činjenice. Prvo, hermitske matrice pripadaju klasi normalnih matrica ($NN^* = N^*N$), pa se uvijek mogu dijagonalizirati. Nadalje, tu dijagonalizaciju uvijek mo zemo napraviti korištenjem unitarnih matrica.

Drugo, hermitske matrice imaju realne svojstvene vrijednosti. Ako je A hermitska, tj. $A^* = A$, onda za skalar λ reći ćemo da je **svojstvena vrijednost**, a vektor x , $x \neq 0$ **svojstveni vektor** matrice A ako vrijedi

$$Ax = \lambda x.$$

Množenjem prethodne relacije slijeva s x^* dobivamo

$$x^*Ax = x^*\lambda x = \lambda \|x\|^2. \quad (1.1)$$

Kompleksnim konjugiranjem prethodne relacije, zbog hermitičnosti matrice A , izlazi

$$x^*A^*x = x^*Ax = \bar{\lambda} \|x\|^2. \quad (1.2)$$

Usporedbom (1.1) i (1.2) izlazi da je $\lambda = \bar{\lambda}$, što pokazuje da je $\lambda \in \mathbb{R}$.

Definicija 1.2. Hermitska matrica $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je **pozitivno definitna** ako za svaki vektor $x \in \mathbb{C}^n$, $x \neq 0$ vrijedi

$$x^*Ax > 0.$$

Matrica A je **pozitivno semidefinitna** ako za svaki vektor $x \in \mathbb{C}^n$, $x \neq 0$ vrijedi

$$x^*Ax \geq 0.$$

Primijetite da u dijelu definicije o pozitivno semidefinitnim matricama nismo morali zahtijevati da je $x \neq 0$.

¹André-Loius Cholesky (1875.–1918.), francuski matematičar ukrajinskog porijekla i časnik u vojsci, bavio se geodetskim istraživanjima i izradom geografskih karata. Sama faktorizacija publicirana je posthumno.

Lema 1.3. *Ako je matrica $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitska i pozitivno definitna, ona je nesingularna.*

Dokaz. Ako je A singularna, sigurno postoji x , $x \neq 0$, takav da je $Ax = 0$. Množenjem slijeva s x^* dobivamo da je $x^*Ax = 0$, što je kontradikcija. \square

Lema 1.4. *Hermitska pozitivno definitna matrica $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ima pozitivne dijagonalne elemente.*

Dokaz. Za vektor x u definiciji pozitivne definitnosti uzmemo $x = e_i$, pri čemu je e_i i -ti vektor kanonske baze. Tada imamo

$$0 < e_i^* A e_i = a_{ii}, \quad i = 1, \dots, n. \quad \square$$

Lema 1.5. *Ako je $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitska i pozitivno definitna i $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ nesingularna, onda je matrica B^*AB hermitska i pozitivno definitna.*

Dokaz. Hermitičnost matrice je očita,

$$(B^*AB)^* = B^*A^*B = B^*AB.$$

Ostaje još dokazati pozitivnu definitnost. Budući da je B nesingularna, onda je za svaki vektor x , $y = Bx \neq 0$, pa vrijedi

$$x^*B^*ABx = (Bx)^*A(Bx) = y^*Ay > 0. \quad \square$$

Napomena 1.6. *Postoji i generalizacija prethodne leme na svaku hermitsku matricu. Ta generalizacija poznata je pod imenom Sylvesterov² zakon o inerciji. Teorem kaže da hermitska matrica A i matrica B^*AB , gdje je B nesingularna imaju istu inerciju. Inercija je uređena trojka (ν, ζ, π) , gdje ν predstavlja broj negativnih, ζ broj nula, a π broj pozitivnih svojstvenih vrijednosti matrice.*

Sylvesterov zakon inercije kaže samo da su takvom transformacijom (koja se, inače, zove i kongruencija), očuvani predznaci svojstvenih vrijednosti, ali ne moraju biti i njihove veličine.

Svojstvene vrijednosti čuvaju se transformacijama sličnosti $B^{-1}AB$, pri čemu je B nesingularna.

*Hermitsku matricu A uvijek možemo dijagonalizirati korištenjem unitarnih sličnosti U , tj. $U^{-1}AU = U^*AU = \Lambda$, pa odmah zaključujemo da su i svojstvene vrijednosti hermitske i pozitivno definitne matrice pozitivne. Nadalje, i matrica A^{-1} je pozitivno definitna ako je A pozitivno definitna (argument korištenjem svojstvenih vrijednosti).*

Definicija 1.7. *Kvadratna matrica P je **matrica permutacije** ako u svakom retku i svakom stupcu ima točno jednu jedinicu, a sve ostalo su nule.*

Navedimo još i nekoliko korisnih činjenica o matricama permutacije.

²James Joseph Sylvester (1814.–1897.), engleski matematičar židovskog porijekla, radio na Johns Hopkins sveučilištu u SAD i na Oxfordu, UK.

Lema 1.8. *Matrice permutacije su ortogonalne matrice, tj.,*

$$P^T P = P P^T = I,$$

što znači da su nesingularne.

Produkt matrica permutacije je opet matrica permutacije.

Definicija 1.9. *Za zadanu blok-matricu $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$,*

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix},$$

pri čemu je matrica A_{11} kvadratna i nesingularna, matrica

$$A = A_{22} - A_{21} A_{11}^{-1} A_{12}$$

zove se **Schurov³ komplement matrice** A_{11} u A , ili kraće samo *Schurov komplement*.

Lema 1.10. *Ako je matrica $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitska i pozitivno definitna, onda su*

- (i) *svaka glavna podmatrica,*
- (ii) *svaki Schurov komplement*

pozitivno definitne matrice.

Dokaz. Neka je A_{11} glavna podmatrica matrice A , reda k . Ta podmatrica je, očito, hermitska, jer je podmatrica hermitske matrice. Tu podmatricu (koja se ne mora nužno nalaziti na mjestima s uzastopnim indeksima, recimo može biti na presjecima trećeg, petog i sedmog retka i stupca), možemo korištenjem permutacije P dovesti u gornji lijevi kut, na susjedna mjesta, tako da vrijedi

$$\tilde{A} = P^T A P = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^* & A_{22} \end{bmatrix}.$$

Prema lemi 1.8, matrica permutacije je nesingularna, pa primjenom leme 1.5 zaključujemo da je i \tilde{A} pozitivno definitna, tj., za svaki $x \neq 0$ je $x^* \tilde{A} x > 0$. Posebno, to vrijedi za vektor

$$x = \begin{bmatrix} y \\ 0 \end{bmatrix},$$

pri čemu je $y \in \mathbb{C}^k$, $y \neq 0$. Dakle,

$$0 < x^* \tilde{A} x = [y^* \ 0] \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^* & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ 0 \end{bmatrix} = y^* A_{11} y,$$

pa odmah vidimo da je A_{11} pozitivno definitna.

³Issai Schur (1875.–1941.), matematičar židovskog porijekla, rođen u Mogilevu (Bjelarus), umro u Izraelu. Do 1933. radio kao profesor u Berlinu, nakon čega su mu predavanja otkazana. Glavno područje znanstvenog interesa bila mu je teorija reprezentacija. Sam naziv Schurov komplement prvi put je upotrijebila Emilia Virginia Haynsworth, 1968. godine.

Sad još treba pokazati i pozitivnu definitnost Schurovog komplementa. Defini-
ramo matricu

$$M = \begin{bmatrix} I_k & 0 \\ -A_{12}^* A_{11}^{-1} & I_{n-k} \end{bmatrix}.$$

Množenjem izlazi

$$M \tilde{A} M^* = \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & S \end{bmatrix}, \quad S = A_{22} - A_{12}^* A_{11}^{-1} A_{12}.$$

Odmah zaključujemo da je M nesingularna (donjetrokutasta s jedinicama na di-
jagonali), pa je $M \tilde{A} M^*$ hermitska i pozitivno definitna. Već smo dokazali da je
svaka glavna podmatrica pozitivne definitne matrice pozitivno definitna, pa je to i
podmatrica S . \square

Prethodna lema daje, zapravo još jednu ocjenu na elemente hermitske pozitivno
definitne matrice A . Ako uzmemo 2×2 podmatricu matrice A ,

$$A_2 = \begin{bmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ \bar{a}_{ij} & a_{jj} \end{bmatrix}$$

mora vrijediti $a_{ii}, a_{jj} > 0$ (determinanta je produkt svojstvenih vrijednosti!) i

$$\det(A_2) = a_{ii}a_{jj} - |a_{ij}|^2 > 0,$$

odnosno

$$|a_{ij}| < \sqrt{a_{ii}a_{jj}}.$$

Time je implicitno dokazana još jedna činjenica o hermitskim pozitivno definitnim
matricama, a to je da najveći element takve matrice mora biti na dijagonali. Naime,
ako s α označimo

$$\alpha = \max_{i,j} \{a_{ii}, a_{jj}\},$$

onda vrijedi

$$|a_{ij}| < \sqrt{a_{ii}a_{jj}} \leq \sqrt{\alpha^2} = \alpha.$$

Upotrijebimo li odnos aritmetičke i geometrijske sredine, lako je dokazati i

$$|a_{ij}| < \frac{a_{ii} + a_{jj}}{2}.$$

Sada smo definirali sve elemente koje ćemo koristiti pri konstrukciji faktorizacije
Choleskog. Naime, algoritam koristi činjenicu da su dijagonalni elementi hermitske
pozitivno definitne matrice pozitivni, kao i činjenicu da je Schurov komplement
hermitski i pozitivno definitan.

Definicija 1.11. *Neka je $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitska i pozitivno definitna matrica. Fakto-
rizaciju oblika*

$$A = LL^*,$$

ili, ekvivalentno

$$A = R^*R,$$

*pri čemu je L donjetrokutasta (R gornjetrokutasta) s pozitivnim dijagonalnim ele-
mentima zovemo **faktorizacija Choleskog** matrice A .*

Algoritam 1.12 (Faktorizacija Choleskog). Za hermitsku pozitivno definitnu matricu $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ algoritam računanja faktorizacije Choleskog je sljedeći:

1. Ako je red matrice A jednak 1, onda je njezina faktorizacija Choleskog

$$A = R^* R, \quad R = \sqrt{A}.$$

Ne zaboravimo A je, zapravo, samo jedan element, koji mora biti pozitivan!

2. Ako je $n > 1$, onda izaberemo za ključni element a_{11} i napravimo djelomičnu faktorizaciju Choleskog (slično kao kod LR faktorizacije)

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a \\ a^* & A_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & \\ r^* & I_{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \\ & S \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r \\ & I_{n-1} \end{bmatrix}.$$

Množenjem faktora izlazi

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a \\ a^* & A_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11}^2 & r_{11}r \\ r^*r_{11} & r^*r + S \end{bmatrix}.$$

Uspoređivanjem dobivamo:

$$r_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad r = r_{11}^{-1}a = a_{11}^{-1/2}a, \quad S = A_{n-1} - r^*r = A_{n-1} - a^*a_{11}^{-1}a.$$

Posao nastavljamo na Schurovom komplementu S , koji je hermitska pozitivno definitna matrica reda $n - 1$.

Lema 1.13. Faktorizacija Choleskog pozitivno definitne matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $A = R^*R$, pri čemu je R je gornjetrokutasta s pozitivnim dijagonalnim elementima je jedinstvena.

Dokaz. Pretpostavimo da imamo dvije faktorizacije Choleskog

$$A = R^*R = \tilde{R}^*\tilde{R}.$$

Budući da su i R i \tilde{R} nesingularne, možemo prethodnu relaciju pomnožiti slijeva s R^{-*} i zdesna s \tilde{R}^{-1} . Imamo

$$R\tilde{R}^{-1} = R^{-*}\tilde{R}^*.$$

Matrica R^* je donjetrokutasta, pa je donjetrokutasti i njezin inverz. Jednako tako \tilde{R}^{-1} je inverz gornjetrokutaste matrice, pa je i sama gornjetrokutasta. Prema tome, na lijevoj strani imamo donjetrokutastu matricu, a na desnoj gornjetrokutastu. To znači da matrice s obje strane prethodne relacije moraju biti dijagonalne. Dakle,

$$R\tilde{R}^{-1} = D, \quad R^{-*}\tilde{R}^* = D.$$

Iz prve relacije imamo

$$R = D\tilde{R}, \tag{1.3}$$

što odmah pokazuje da D mora biti realna matrica (d_{ii} su skala kojom se realni dijagonalni elementi matrice \tilde{R} množe da se dobiju realni dijagonalni elementi matrice R) s pozitivnom dijagonalom. Iz druge jednadžbe, konjugiranjem lijeve i desne strane, izlazi

$$\tilde{R}R^{-1} = D,$$

odnosno

$$\tilde{R} = DR.$$

Uvrštavanjem u (1.3) dobivamo

$$R = D^2R,$$

tj., $D^2 = I$, što je jedino moguće ako je $D = I$. □

S druge strane, ako imamo za neku matricu faktorizaciju oblika $A = R^*R$, pri čemu je R gornjetrokutasta s pozitivnim dijagonalnim elementima, onda tvrdimo da je matrica A hermitska i pozitivno definitna.

Teorem 1.14. *Neka je $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitska. A je pozitivno definitna ako i samo ako je $A = R^*R$, pri čemu je R gornjetrokutasta s pozitivnim dijagonalnim elementima.*

Dokaz. Jednu stranu smo već dokazali. Treba pokazati, ako matricu definiramo faktorizacijom $A = R^*R$, R gornjetrokutasta s pozitivnim dijagonalnim elementima, onda je A pozitivno definitna. Uočimo da je matrica R nesingularna, tj. za svaki $x \neq 0$ vrijedi $Rx \neq 0$.

Prema definiciji imamo

$$x^*Ax = x^*R^*Rx = (Rx)^*(Rx) = \|Rx\|_2^2 > 0. \quad \square$$

Napomena 1.15. *Prethodna tvrdnja može se i generalizirati. Čim je matrica A zadana faktorom (može i pravokutnim), ne nužno trokutastim,*

$$A = G^*G,$$

onda je A pozitivno semidefinitna. Dokaz te činjenice sličan je dokazu prethodnog teorema.

Umjesto faktorizacije Choleskog može se raditi i blok faktorizacija Choleskog, koja je značajna za numeričko računanje. Ako je

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{12}^* & A_{22} \end{bmatrix}$$

blok particija matrice A , onda je njezina blok faktorizacija Choleskog oblika $A = R^*R$, pri čemu je

$$R = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ & R_{22} \end{bmatrix}.$$

Pritom dijagonalni blokovi R_{11} i R_{22} ne moraju biti gornjetrokutasti.

Nadalje, za stabilnost faktorizacije Choleskog važna je i činjenica da za svaku kvadratnu podmatricu A_{11} njezin Schurov komplement i njezina uvjetovanost u normi-2 su manji nego norma-2 i uvjetovanost originalne matrice A , tj. vrijedi

$$\begin{aligned} \|A_{22} - A_{12}^*A_{11}^{-1}A_{12}\|_2 &\leq \|A\|_2 \\ \kappa_2(A_{22} - A_{12}^*A_{11}^{-1}A_{12}) &\leq \kappa_2(A). \end{aligned}$$

1.2. Definicije i oznake

Središnje pitanje teorije perturbacije, prema [7] je: “Koliko se funkcija promijeni ako se promijeni njezin argument.” Funkcija generelno može biti bilo kakva, ali u ovom kolegiju baviti ćemo se samo matricnim funkcijama, kao što su to rješavanje linearnih sustava sa specijalnom strukturom, ili računanje singularnih vrijednosti specijalnih matrica.

Rezultat perturbacijske analize, u načelu je, ocjena na veličinu perturbacije i uobičajeno se izražava obzirom na poznatu veličinu (neperturbirani argument).

Vrlo često, ako se radi o matricama, teško je ocjenjivati svaki element perturbirane matrice obzirom na neperturbiranu, jer takva analiza ima n^2 (pri čemu je n red matrice) parametara. Zbog toga se tradicionalno rade perturbacije po normi matrice.

Dvije najčešće korištene norme (pogledajte kurs Numeričke analize) su euklidska ili Frobeniusova (oznaka – indeks F) i spektralna norma (oznaka – indeks 2). Prisjetimo se njihovih definicija

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2} = \sqrt{\operatorname{tr}(A^*A)},$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^*A)} = \sigma_{\max}(A),$$

pri čemu ρ označava **spektralni radijus** matrice (po apsolutnoj vrijednosti najveću svojstvenu vrijednost), a σ **singularnu vrijednost** matrice.

Također, u ocjenama se često koristi svojstvo da je

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_F.$$

Dokaz te činjenice je jednostavan. Budući da je matrica A^*A pozitivno semidefinitna, njezine su svojstvene vrijednosti nenegativne, pa je:

$$\begin{aligned} \|A\|_2^2 &= \rho(A^*A) = \max_{i=1,\dots,n} |\lambda_i(A^*A)| = \max_{i=1,\dots,n} \lambda_i(A^*A) \\ &\leq \sum_{i=1}^n \lambda_i(A^*A) = \operatorname{tr}(A^*A) = \|A\|_F^2. \end{aligned}$$

Kad se radi o perturbacijama koje uključuju elemente matrica, potrebno je definirati matricnu apsolutnu vrijednost.

Definicija 1.16. *Neka je $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ zadana matrica. Matrica $|A|$ je apsolutna vrijednost matrice A ako za elemente matrice $|A|$ vrijedi*

$$|A|_{ij} = |a_{ij}|.$$

Jednako tako, u dokazima su potrebna i svojstva kako norma ‘reagira’ na matricnu apsolutnu vrijednost [2].

Definicija 1.17. Neka su $A, B \in \mathbb{C}^{m \times n}$. Matrična norma $\| \cdot \|$ je monotona, ako za svaki par matrica A, B , takav da je $|A| \leq |B|$, vrijedi $\|A\| \leq \|B\|$.

Matrična norma je apsolutna, ako vrijedi $\|A\| = \| |A| \|$.

Propozicija 1.18. Euklidska norma matrice je monotona i apsolutna.

Dokaz. Dokaz je trivijalna posljedica definicije euklidske (Frobeniusove) norme

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}. \quad \square$$

U seriji članaka osamdesetih i devedestih godina prošlog stoljeća, Ji-guang Sun koristio je i sljedeće oznake za ‘dijelove’ matrice A .

Definicija 1.19. Neka je $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Tada matrice $\text{diag}(A)$, $\text{tril}(A)$, $\text{tril}^*(A)$, $\text{triu}(A)$, $\text{triu}^*(A)$ redom označavaju

$$\begin{aligned} \text{diag}(A) &= \text{diag}(a_{11}, a_{22}, \dots, a_{nn}), \\ \text{tril}(A) &= \begin{cases} a_{ij} & i \geq j, \\ 0 & \text{inače,} \end{cases} & \text{triu}(A) &= \begin{cases} a_{ij} & i \leq j, \\ 0 & \text{inače,} \end{cases} \\ \text{tril}^*(A) &= \begin{cases} a_{ij} & i > j, \\ 0 & \text{inače,} \end{cases} & \text{triu}^*(A) &= \begin{cases} a_{ij} & i < j, \\ 0 & \text{inače.} \end{cases} \end{aligned}$$

Posljednji dio matrične teorije koji treba za dokazivanje teorema su definicija i svojstva M -matrica. Dokazi se mogu pogledati u [3].

Propozicija 1.20. Svaka M -matrica A se može zapisati u obliku $A = \alpha I - P$, pri čemu je $P \geq 0$, a za spektralni radijus matrice P vrijedi $\alpha \geq \rho(P)$. (U ovom slučaju \geq znači da su svi elementi veći ili jednaki 0.)

Propozicija 1.21. Ako je A M -matrica oblika $A = I - E$ i spektralni radijus $\rho(E) < 1$, onda je A nesingularna i $A^{-1} \geq 0$.

1.3. Perturbacija faktorizacije Choleskog

Prvo ćemo promatrati perturbacijske ocjene po normi za faktorizaciju Choleskog [8]. Neka je A pozitivno definitna matrica za koju je faktorizacija Choleskog

$$A = LL^*,$$

pri čemu L ima pozitivne dijagonalne elemente (što u daljnjem tekstu smatramo da vrijedi i nećemo to posebno naglašavati). Nadalje, neka je E hermitska matrica, takva da je $A + E$ pozitivno definitna matrica, kojoj je faktorizacija Choleskog

$$A + E = (L + G)(L + G)^*.$$

Pokazat ćemo kako možemo pronaći donju i gornju ogradu za $\|G\|/\|L\|$ u terminima $\|E\|/\|A\|$.

Počet ćemo s jednostavnom relacijom za pozitivne brojeve i pokušati tu istu relaciju dobiti kao matičnu relaciju. Neka su α i ρ pozitivni brojevi takvi da vrijedi

$$\alpha = \rho^2.$$

Za bilo koji realni broj ϵ takav da je $|\epsilon| < \alpha$, postoji jedinstven broj γ takav da vrijedi da je $\rho + \gamma$ pozitivan broj i $\alpha + \epsilon = (\rho + \gamma)^2$. Za takva četiri broja vrijedi relacija

$$\frac{\gamma}{\rho} = \frac{\epsilon/\alpha}{1 + \sqrt{1 + \epsilon/\alpha}}, \quad (1.4)$$

odnosno

$$\frac{|\epsilon|/\alpha}{1 + \sqrt{1 + |\epsilon|/\alpha}} \leq \frac{|\gamma|}{\rho} \leq \frac{|\epsilon|/\alpha}{1 + \sqrt{1 - |\epsilon|/\alpha}}.$$

Prethodna relacija dokazuje se dijeljenjem lijeve i desne strane relacije $\alpha + \epsilon = (\rho + \gamma)^2$ s α , te korištenjem činjenice da je $\alpha = \rho^2$.

Gledamo li na drugi način činjenicu da je $\alpha = \rho^2$, deriviranjem dobivamo $d\alpha = 2\rho d\rho$, odnosno

$$\frac{|d\rho|}{\rho} = \frac{1}{2} \frac{|d\alpha|}{\alpha}. \quad (1.5)$$

I relacija (1.4) i relacija (1.5) izražavaju vezu relativne perturbacije ρ i relativne perturbacije α .

Teorem 1.22. *Neka je $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ pozitivno definitna matrica i neka je $A = LL^*$ njezina faktorizacija Choleskog. Ako je E hermitska matrica koja zadovoljava*

$$\|A^{-1}\|_2 \|E\|_F < \frac{1}{2}, \quad (1.6)$$

tada postoji jedinstvena faktorizacija Choleskog oblika

$$A + E = (L + G)(L + G)^* \quad (1.7)$$

i vrijedi

$$\frac{\|G\|_F}{\|L\|_p} \leq \sqrt{2} \frac{\kappa_2(A) \|E\|_F / \|A\|_p}{1 + \sqrt{1 - 2\kappa_2(A) \|E\|_F / \|A\|_2}}, \quad (1.8)$$

pri čemu je $p = 2, F$, a κ_2 predstavlja uvjetovanost u normi 2, tj. vrijedi

$$\kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2.$$

Dokaz. Budući da je matrica $A + E$ pozitivno definitna, postoji donjetrokutasta matrica $L + G$ s pozitivnim dijagonalnim elementima, takva da vrijedi

$$A + E = (L + G)(L + G)^* = LL^* + GL^* + LG^* + GG^*.$$

Uvrstimo li da je $A = LL^*$ u prethodnu jednadžbu, dobivamo

$$E = GL^* + LG^* + GG^*.$$

Množenjem prethodne relacije slijeva s L^{-1} (L donjetrokutasta s pozitivnom dijagonalom, pa onda i nesingularna) i zdesna s L^{-*} , dobivamo

$$L^{-1}EL^{-*} = L^{-1}G + G^*L^{-*} + L^{-1}GG^*L^{-*}.$$

Prebacivanjem posljednjeg člana na lijevu stranu, i sređivanjem izraza, dobivamo

$$L^{-1}G + (L^{-1}G)^* = L^{-1}EL^{-*} - L^{-1}G(L^{-1}G)^*. \quad (1.9)$$

Neka je T linearni operator koji prostor donjetrokutastih matrica s realnim dijagonalnim elementima preslikava u prostor hermitskih matrica. Definiramo operator T s

$$TX = X + X^*. \quad (1.10)$$

Tvrdimo da je T nesingularan operator (što se odmah vidi da je injekcija i surjekcija, tj. za svaku hermitsku matricu postoji jedinstveni X takav da je $TX = H$), pa je i invertibilan. Tvrdimo da vrijedi sljedeća ocjena

$$\|T^{-1}H\|_F \leq \frac{1}{\sqrt{2}}\|H\|_F. \quad (1.11)$$

Ako je K donjetrokutasta matrica, onda vrijedi

$$\|K + K^*\|_F^2 = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^i 2|k_{ij}|^2 = 2\|K\|_F^2.$$

Odatle, zajedno s $TX = H$ slijedi

$$\sqrt{2}\|X\|_F \leq \|X + X^*\|_F = \|H\|_F, \quad (1.12)$$

tj.

$$\|T^{-1}H\|_F = \|X\|_F \leq \frac{1}{\sqrt{2}}\|H\|_F,$$

čime je dokazana relacija (1.11).

Nadalje, vrijedi

$$\|T^{-1}\|_F := \sup_{H \text{ hermitska} \neq 0} \frac{\|T^{-1}H\|_F}{\|H\|_F} \leq \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (1.13)$$

Sada se možemo vratiti na relaciju (1.9). Ako označimo s

$$\Gamma = L^{-1}EL^{-*}, \quad X = L^{-1}G, \quad \varphi(X) = XX^*,$$

onda (1.9) možemo zapisati kao

$$X + X^* = \Gamma - XX^*,$$

odnosno

$$TX = \Gamma - \varphi(X), \quad (1.14)$$

pri čemu je operator T definiran s (1.10).

Nije teško pokazati da zbog konzistentnosti euklidske norme

$$\|A \cdot B\|_F \leq \|A\|_F \|B\|_F,$$

za funkciju φ vrijedi

$$\|\varphi(X)\|_F = \|XX^*\|_F \leq \|X\|_F \|X^*\|_F = \|X\|_F^2.$$

Za bilo koje dvije donjetrokutaste matrice X i Y onda vrijedi

$$\begin{aligned} \|\varphi(X) - \varphi(Y)\|_F &= \|XX^* - YY^*\|_F \\ &= \|XX^* - XY^* + XY^* - YY^*\|_F \\ &= \|X(X^* - Y^*) + (X - Y)Y^*\|_F \\ &\leq \|X(X^* - Y^*)\|_F + \|(X - Y)Y^*\|_F \\ &\leq \|X\|_F \|X^* - Y^*\|_F + \|(X - Y)\|_F \|Y^*\|_F \\ &= \|X\|_F \|X - Y\|_F + \|(X - Y)\|_F \|Y^*\|_F \\ &= (\|X\|_F + \|Y^*\|_F) \|X - Y\|_F \\ &\leq 2 \max\{\|X\|_F + \|Y^*\|_F\} \|X - Y\|_F. \end{aligned}$$

Definiramo

$$\delta = \|T^{-1}\|_F^{-1}, \quad \gamma = \|\Gamma\|_F.$$

Iz relacije (1.13) slijedi da je

$$\delta \geq \sqrt{2}.$$

Korištenjem pretpostavke (1.6) i tehničkog Teorema 3.1 iz [6] može se dokazati da za X koji ispunjava $TX = \Gamma - \varphi(X)$, vrijedi

$$\|X\|_F < \frac{2\gamma}{\delta} \leq \sqrt{2} \|A^{-1}\|_2 \|E\|_F < \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (1.15)$$

Sada još samo treba skupiti rezultate. Iz relacija (1.11)–(1.12) i (1.14) slijedi

$$\sqrt{2} \|X\|_F \leq \|A^{-1}\|_2 \|E\|_F + \|X\|_F^2.$$

Ako označimo

$$t = \|X\|_F, \quad \zeta = \|A^{-1}\|_2 \|E\|_F,$$

prethodnu relaciju možemo napisati kao

$$t^2 - t\sqrt{2} + \zeta \geq 0.$$

Uz pretpostavku teorema $\zeta < 1/2$, prethodna jednačba ima dva realna korijena t_1 i t_2

$$\begin{aligned} t_1 &= \frac{\sqrt{2} - \sqrt{2 - 4\zeta}}{2} < \frac{1}{\sqrt{2}} \\ t_2 &= \frac{\sqrt{2} + \sqrt{2 - 4\zeta}}{2} > \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned}$$

Budući da je $t = \|X\|_F < \frac{1}{\sqrt{2}}$, onda, deracionalizacijom dobivamo

$$t \leq t_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{2\zeta}{1 + \sqrt{1 - 2\zeta}}.$$

Konačno, uvrštavanjem značenja za t i ζ , dobivamo

$$\|L^{-1}G\|_F \leq \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{2\|A^{-1}\|_2\|E\|_F}{1 + \sqrt{1 - 2\|A^{-1}\|_2\|E\|_F}}.$$

Konačni rezultat dobivamo iz

$$\|L^{-1}G\|_F \geq \|L\|_2^{-1}\|G\|_F, \quad \|L\|_F \geq \|A\|_F\|L\|_2^{-1}.$$

Posljednje dvije relacije se dokazuju korištenjem rezultata (zadatak 21, str. 313 iz [2]),

$$\|AB\|_F \leq \|A\|_2\|B\|_F, \quad \|AB\|_F \leq \|A\|_F\|B\|_2. \quad \square$$

U istom članku javlja možemo naći i gornju ogradu za perturbaciju.

Teorem 1.23. *Neka su matrice $A, L, E \in \mathbb{C}^{n \times n}$ kao iz teorema 1.22. Tada za matricu $A + E$ postoji jedinstvena faktorizacija Choleskog koja zadovoljava*

$$\frac{\|E\|_F/\|A\|_2}{1 + \sqrt{1 + 2\|E\|_F/\|A\|_2}} \leq \frac{\|G\|_F}{\|L\|_2}, \quad (1.16)$$

i

$$\frac{\|E\|_F/\tilde{\kappa}(A)\|A\|_F}{1 + \sqrt{1 + \|E\|_F/\tilde{\kappa}(A)\|A\|_F}} \leq \frac{\|G\|_F}{\|L\|_F}, \quad (1.17)$$

pri čemu je

$$\tilde{\kappa}(A) = \|A\|_F\|A^{-1}\|_2.$$

Dokaz. Iz dokaza prethodnog teorema znamo da je

$$E = GL^* + LG^* + GG^*,$$

pa je

$$\|E\|_F \leq 2\|L\|_2\|G\|_F + \|G\|_F^2. \quad (1.18)$$

Ako označimo

$$t = \frac{\|G\|_F}{\|L\|_2}, \quad \zeta = \frac{\|E\|_F}{\|A\|_2},$$

tada se (1.18) može zapisati kao

$$t^2 + 2t - \zeta \geq 0. \quad (1.19)$$

Jednadžba $t^2 + 2t - \zeta = 0$ ima dva realna korijena t_1 i t_2 ,

$$t_1 = -1 - \sqrt{1 + \zeta} < 0, \quad t_2 = -1 + \sqrt{1 + \zeta} \geq 0.$$

Zbog toga, u nejednakosti (1.19), korištenjem deracionalizacije imamo

$$t \geq t_2 = \frac{\zeta}{1 + \sqrt{1 + \zeta}},$$

čime je pokazana prva od traženih nejednakosti. Nadalje, iz (1.18) izlazi i

$$\|E\|_F \leq 2\|L\|_F\|G\|_F + \|G\|_F^2,$$

pa kombiniranjem s

$$\|A\|_F \geq \|L\|_F\|L^{-1}\|_2^{-1}, \quad \|L\|_F\|L^{-1}\|_2 \leq \|A\|_F\|A^{-1}\|_2. \quad \square$$

Osim analiza grešaka po normi, može se raditi i analiza grešaka po elementima. Pretpostavimo da su $A, \tilde{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ poznate dvije pozitivno definitne matrice, kao i Choleskyjev faktor \tilde{L} (s pozitivnim dijagonalnim elementima matrice \tilde{A}). Sljedeći teorem iz [9] daje komponentnu ocjenu faktora L matrice A .

Teorem 1.24. *Neka su $A, \tilde{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ hermitske i pozitivno definitne matrice i neka su L i \tilde{L} redom njihovi faktori Choleskog. Neka je $E = \tilde{A} - A$ i $G = \tilde{L} - L$ i definiramo*

$$E_\ell = |\tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}|. \quad (1.20)$$

Ako je

$$\rho(E_\ell) < 1, \quad (1.21)$$

slijedi da je

$$|G| \leq |\tilde{L}| \operatorname{tril}((I - E_\ell)^{-1}E_\ell). \quad (1.22)$$

Dokaz. Prema definiciji matrice E , izlazi

$$\begin{aligned} E &= \tilde{L}\tilde{L}^* - LL^* = \tilde{L}\tilde{L}^* - \tilde{L}L^* + \tilde{L}L^* - LL^* \\ &= \tilde{L}(\tilde{L}^* - L^*) + (\tilde{L} - L)L^* = \tilde{L}G^* + GL^*. \end{aligned}$$

Množenjem s \tilde{L}^{-1} slijeva i s L^{-*} zdesna, dobivamo

$$\tilde{L}^{-1}EL^{-*} = \tilde{L}^{-1}G + (L^{-1}G)^*.$$

Matrica $\tilde{L}^{-1}G$ je donjetrokutasta, a $(L^{-1}G)^*$ je gornjetrokutasta, a njihovi dijagonalni elementi imaju isti predznak. Odatle slijedi da mora vrijediti

$$|\tilde{L}^{-1}G| \leq \operatorname{tril}(|\tilde{L}^{-1}EL^{-*}|), \quad (1.23)$$

i, slično,

$$|(\tilde{L}^{-1}G)^*| \leq \operatorname{triu}(|\tilde{L}^{-1}EL^{-*}|). \quad (1.24)$$

Iskoristimo li relaciju (1.24) s formulom za $\tilde{L}^{-1}EL^{-*}$, dobivamo ocjenu za $\tilde{L}^{-1}EL^{-*}$. Množenjem definicijske relacije $\tilde{L} - L = G$ slijeva s L^{-1} i zdesna s \tilde{L}^{-1} , dobivamo

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

Konjugiranjem te relacije i množenjem slijeva s $\tilde{L}^{-1}E$, izlazi

$$\tilde{L}^{-1}EL^{-*} - \tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*} = \tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}(L^{-1}G)^*.$$

Prebacivanjem drugog člana na desnu stranu, dobivamo

$$\tilde{L}^{-1}EL^{-*} = \tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*} + \tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}(L^{-1}G)^*,$$

odakle slijedi da je

$$\begin{aligned} |\tilde{L}^{-1}EL^{-*}| &= |\tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*} + \tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}(L^{-1}G)^*| \\ &\leq |\tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}| + |\tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}(L^{-1}G)^*| \\ &= |\tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}| + |\tilde{L}^{-1}E\tilde{L}^{-*}| |(L^{-1}G)^*| \\ &= E_\ell + E_\ell |(L^{-1}G)^*|. \end{aligned}$$

Korištenjem (1.24), slijedi

$$\begin{aligned} |\tilde{L}^{-1}EL^{-*}| &\leq E_\ell + E_\ell |(L^{-1}G)^*| \leq E_\ell + E_\ell \text{triu}(|\tilde{L}^{-1}EL^{-*}|) \\ &\leq E_\ell + E_\ell |\tilde{L}^{-1}EL^{-*}|. \end{aligned}$$

Prebacivanjem posljednjeg člana zdesna nalijevo, dobivamo

$$(I - E_\ell)|\tilde{L}^{-1}EL^{-*}| \leq E_\ell. \quad (1.25)$$

Uvjet (1.21), zapravo, daje da je $I - E_\ell$ nesingularna i M–matrica. Korištenjem propozicije 1.21 o M–matricama, izlazi da je matrica $(I - E_\ell)^{-1}$ pozitivna. Konačno, množenjem (1.25) slijeva s $(I - E_\ell)^{-1}$, dobivamo

$$|\tilde{L}^{-1}EL^{-*}| \leq (I - E_\ell)^{-1}E_\ell.$$

Iz

$$|G| = |\tilde{L}\tilde{L}^{-1}G| \leq |\tilde{L}| |\tilde{L}^{-1}G|$$

i (1.23), izlazi

$$|G| \leq |\tilde{L}| \text{tril}((I - E_\ell)^{-1}E_\ell). \quad \square$$

1.4. Analiza grešaka zaokruživanja za faktorizaciju Choleskog

Prije no što se upustimo u analizu grešaka zaokruživanja, potrebno je ugrubo ponoviti aritmetiku računala i rasporsiranje grešaka zaokruživanja. IEEE standard predviđa da za četiri osnovne aritmetičke operacije (+, −, ·, /) označene kao o vrijedi

$$fl(x \circ y) = (1 + \varepsilon)(x \circ y), \quad |\varepsilon| \leq u,$$

pri čemu je u jedinična greška zaokruživanja. Slično pretpostavljamo i za unarnu operaciju $\sqrt{\cdot}$.

Samu relativnu grešku ε interpretirat ćemo kao rezultat egzaktne operacije \circ na malo perturbiranim ulaznim podacima. Prema tome

$$(1 + \varepsilon)(x \circ y) = (1 + \varepsilon_x)x \circ (1 + \varepsilon_y)y.$$

Pretpostavljamo da pozitivno definitnu matricu A želimo faktorizirati u aritmetici računala faktorizacijom Choleskog. Da bismo mogli točno analizirati što se događa, moramo napisati precizan algoritam kojim ćemo računati tu faktorizaciju, pa onda analizirati svaku aritmetičku operaciju koja se javlja.

Da bismo si olakšali analizu, faktorizaciju provodimo samo za simetrične matrice (vidjeti [1]), ali nije teško analizu napraviti i za kompleksne matrice [5].

Algoritam 1.25 (Faktorizacija Choleskog). *Faktorizacija Choleskog simetrične pozitivno definitne matrice $A = LL^T$ računa se sljedećim algoritmom.*

```

for i = 1 to n
   $\ell_{ii} = \left( a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik}^2 \right)^{1/2}$ 
  for j = i + 1 to n
     $\ell_{ji} = \left( a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{jk} \ell_{ik} \right) / \ell_{ii}$ 
  endfor
endfor

```

Lema 1.26. *Neka je L Cholesky faktor matrice A izračunat u aritmetici računala s jediničnom greškom zaokruživanja u , algoritmom 1.25. Tada je*

$$LL^T = A + E,$$

pri čemu je

$$|e_{ij}| \leq \frac{(n+1)u}{1 - (n+1)u} \sqrt{a_{ii}a_{jj}}.$$

Dokaz. S ε_i označavamo nezavisne brojeve za koje vrijedi

$$|\varepsilon_i| \leq u.$$

Prvo analizirajmo prvu liniju for petlje. ‘Vanjska’ operacija je korjenovanje, pa ona nosi relativnu grešku ε_1 . Vidljivo je još jedno izdvojeno oduzimanje ($a_{ii} - \text{suma}$), pa i ono nosi relativnu grešku ε_2 .

Sada ostaje analizirati još što se događa pri sumiranju kvadrata. Svako kvadriranje nosi relativnu grešku ε'_0 . Kad sekvencijalno zbrajamo rezultate, nakon kvadriranja, svaki od brojeva pretrpit će najviše $i - 1$ operacija, pa lineariziranjem greške izlazi

$$(1 + \varepsilon'_1)(1 + \varepsilon'_2) \cdots (1 + \varepsilon'_{i-1}) \approx (1 + (i-1)\varepsilon_{k+2}).$$

Zajedno s kvadriranjem, izlazi da je

$$\ell_{ii} = (1 + \varepsilon_1) \left((1 + \varepsilon_2)a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik}^2 (1 + i\varepsilon_{k+2}) \right)^{1/2}. \quad (1.26)$$

Usporedimo sad greške u izračunatim dijagonalnim elementima. Iz dijagonalnih elemenata $LL^T = A + E$, dobivamo

$$\sum_{k=1}^i \ell_{ii}^2 = a_{ii} + e_{ii}.$$

Sumu na lijevoj strani analiziramo na sličan način kao sumu u (1.26), pa je

$$e_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^i (1 + (i+1)\varepsilon_k) \ell_{ik}^2 = - \sum_{k=1}^n (i+1)\varepsilon_k \ell_{ik}^2,$$

pa je

$$|e_{ii}| \leq (i+1)\varepsilon \sum_{k=1}^i \ell_{ik}^2. \quad (1.27)$$

Uvrštavanjem te relacije u

$$\sum_{k=1}^i \ell_{ii}^2 \leq a_{ii} + |e_{ii}|,$$

dobivamo

$$\sum_{k=1}^i \ell_{ii}^2 \leq a_{ii} + (i+1)\varepsilon \sum_{k=1}^i \ell_{ik}^2,$$

odnosno

$$\sum_{k=1}^i \ell_{ii}^2 \leq (1 - (i+1)\varepsilon) a_{ii}.$$

Uvrstimo li to ponovno u (1.27) dobivamo željeni rezultat

$$|e_{ii}| \leq \frac{(i+1)u}{1 - (i+1)u} \leq \frac{(n+1)u}{1 - (n+1)u}.$$

Za vandijagonalne elemente matrice L vrijedi slična analiza kao u (1.26).

$$\ell_{ji} = (1 + \varepsilon_1) \left((1 + \varepsilon_2) a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{jk} \ell_{ik} (1 + i\varepsilon_{k+2}) \right) / \ell_{ii}. \quad (1.28)$$

Iz vandijagonalnih elemenata $LL^T = A + E$, dobivamo

$$\sum_{k=1}^i \ell_{jk} \ell_{ik} = a_{ji} + e_{ji},$$

pri čemu je

$$|e_{ji}| \leq (i+i)u \sum_{k=1}^i |\ell_{jk} \ell_{ik}|.$$

Korištenjem Cauchy⁴–Schwarzove⁵ nejednakosti imamo

$$\sum_{k=1}^i |\ell_{jk}\ell_{ik}| \leq \left(\sum_{k=1}^i \ell_{jk}^2 \sum_{k=1}^i \ell_{ik}^2 \right)^{1/2} \leq \frac{\sqrt{a_{ii}a_{jj}}}{1 - (j+1)u} \leq \frac{\sqrt{a_{ii}a_{jj}}}{1 - (n+1)u},$$

što je i trebalo dokazati. □

Da bismo pojednostavnili notaciju, definiramo matricu \tilde{A} , takvu da ja

$$\tilde{a}_{ij} = \sqrt{a_{ii}a_{jj}}.$$

Primijetimo da, ako s D označimo matricu koja je jednaka korijenu dijagonalnih elemenata matrice A , a izvan toga ima samo nule, tj. ako je $D = \sqrt{\text{diag}(A)}$, dobivamo da je

$$A_s = D^{-1}\tilde{A}D^{-1}$$

matrica koja je sastavljena od samih jedinica.

Uz prethodnu definiciju, lemu 1.26 možemo interpretirati i na sljedeći način: $LL^T = A + E$, gdje (po elementima) vrijedi

$$|E| \leq \frac{(n+1)u}{1 - (n+1)u} \tilde{A},$$

ili

$$|L||L^T| \leq \frac{1}{1 - (n+1)u} \tilde{A}.$$

Ovakve analize grešaka zaokruživanja mogu se dalje koristiti pri računanju rješenja trokutastih sustava, kao i kod analize algoritma za traženje svojstvenih vrijednosti simetrične pozitivno definitne matrice.

⁴Augustin Louis Cauchy (1789.–1857.), francuski matematičar posebno poznat po svojim radovima u analizi.

⁵Hermann Amandus Schwarz (1843.–1921.), njemački matematičar rođen u današnjoj Poljskoj, bavio se konformnim preslikavanjima i plohama minimalne površine.

Bibliografija

- [1] J. W. DEMMEL, *On floating point errors in Cholesky*, Technical Report CS-89-87, University of Tennessee, Knoxville, Oct. 1989. also, LAPACK Working Note 014.
- [2] R. A. HORN AND C. R. JOHNSON, *Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, 1985.
- [3] —, *Topics in Matrix Analysis*, Cambridge University Press, Cambridge, 1991.
- [4] I. C. F. IPSEN, *Numerical Matrix Analysis: Linear Systems and Least Squares*, SIAM, Philadelphia, 2009.
- [5] S. SINGER AND S. SINGER, *Floating-point errors in complex cholesky algorithms*, in Numerical Methods and Error Bounds, Proceedings of the IMACS-GAMM International Symposium on Numerical Methods and Error Bounds, Oldenburg, Germany, Jul. 9–12, 1995., G. Alefeld and J. Herzberger, eds., Berlin, 1996, Akademie Verlag, pp. 249–254.
- [6] G. W. STEWART, *Error and perturbation bounds for subspaces associated with certain eigenvalue problems*, SIAM Rev., 15 (1973), pp. 727–764.
- [7] G. W. STEWART AND J.-G. SUN, *Matrix Perturbation Theory*, Academic Press, Boston, 1990.
- [8] J.-G. SUN, *Perturbation bounds for the Cholesky and QR factorizations*, BIT, 31 (1991), pp. 341–352.
- [9] —, *Componentwise perturbation bounds for some matrix decompositions*, BIT, 32 (1992), pp. 702–714.