Μαριλενα Μητρουλη

Τμήμα Μαθηματικών
Εθνικό και Καποδιστριακό Πανεπιστήμιο Αθηνών

Αριθμητικη Γραμμικη Αλγεβρα
και
Επιστημονικοι Υπολογισμοι

Αθήνα 2022

Εκδόσεις ΕΚΠΑ

Κεφάλαιο 1

Παραγοντοποιήσεις Πινάκων Ειδικής Μορφής

Η παραγοντοποίηση ενός πίνακα μπορεί να επιτευχθεί και με απ'ευθείας προσδιορισμό της ειδικής μορφής που επιθυμούμε. Θεωρούμε το ακόλουθο παράδειγμα.

Απ' ευθείας τριγωνική διαχώριση
Έστω ότι έναν δοσμένο πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ θέλουμε να τον γράψουμε σε γινόμενο δύο παραγόντων όπου ο ένας παράγοντας να είναι κάτω τριγωνικός πίνακας L και ο άλλος να είναι άνω τριγωνικός πίνακας U, δηλαδή

$$A = LU.$$

Ας θεωρήσουμε αρχικά ότι οι πίνακες είναι διάστασης $n = 3$, οπότε θα έχουμε

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$$

Για να μπορέσουμε να προσδιορίσουμε τα στοιχεία των πινάκων L και U χρειάζεται να διακρίνουμε τις ακόλουθες περιπτώσεις:
Εάν $l_{ii} = 1 \rightarrow$ Προκύπτει η μέθοδος *Doolittle*
Εάν $u_{ii} = 1 \rightarrow$ Προκύπτει η μέθοδος *Crout*

Μέθοδος *Doolittle*

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11}u_{11} & l_{11}u_{12} & l_{11}u_{13} \\ l_{21}u_{11} & l_{21}u_{12} + l_{22}u_{22} & l_{21}u_{13} + l_{22}u_{23} \\ l_{31}u_{11} & l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} & l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33}u_{33} \end{pmatrix},$$

όμως $l_{ii} = 1$ και με απ' ευθείας εξίσωση των στοιχείων των πινάκων υπολογίζουμε :

1η γραμμή του U: $a_{11} = u_{11}, \quad a_{12} = u_{12}, \quad a_{13} = u_{13}.$
1η στήλη του L : $a_{21} = l_{21}u_{11} \Rightarrow l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}}, \quad l_{31} = \frac{a_{31}}{u_{11}}.$
2η γραμμή του U : $a_{22} = l_{21}u_{12} + u_{22} \Rightarrow u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}$

$$a_{23} = l_{21}u_{13} + u_{23} \Rightarrow u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}.$$

2η στήλη του L : $a_{32} = l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} \Rightarrow l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}u_{12}}{u_{22}}.$
3η γραμμή του U : $a_{33} = l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + l_{33}u_{33} \Rightarrow u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}.$

Οι παραπάνω σχέσεις γενικεύονται στον ακόλουθο αλγόριθμο, ο οποίος υπολογίζει τη *Doolittle* παραγοντοποίηση ενός δοσμένου πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Αλγόριθμος *Doolittle*:

for $r = 1, 2, ..., n$
    $u_{rr} = a_{rr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}u_{jr}$
    for $p = r+1, ..., n$
        $u_{rp} = a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}u_{jp}$ $\longleftarrow rflops$
        $l_{pr} = \frac{(a_{pr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{pj}u_{jr})}{u_{rr}}$ $\longleftarrow rflops$
    end
end

Πολυπλοκότητα:
Δεδομένου ότι για τον υπολογισμό κάθε εισόδου u_{rp} και κάθε εισόδου l_{pr} απαιτούνται $rflops$ αντίστοιχα, η συνολική πολυπλοκότητα εκφράζεται ως εξής:

$$2\sum_{r=1}^{n}(n-r)r = 2 \cdot \{n\sum_{r=1}^{n} r - \sum_{r=1}^{n} r^2\} \approx O(2\frac{n^3}{6}) = O(\frac{n^3}{3}).$$

1.1 Τριγωνική διαχώριση

Έστω $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Θεωρούμε το πρόβλημα καθορισμού ενός μοναδιαίου κάτω τριγωνικού πίνακα L και ενός άνω τριγωνικού πίνακα U έτσι ώστε:

$$A = LU.$$

Υπό μορφή συντεταγμένων έχουμε

$$a_{ij} \;=\; \sum_{s=1}^{n} \ell_{is}u_{sj}. \tag{1.1}$$

Αλλά, αφού $\ell_{is} = 0$ εάν $s > i$ και $u_{sj} = 0$ εάν $s > j$, τελικά ισχύει

$$a_{ij} \;=\; \sum_{s=1}^{\min\{i,j\}} \ell_{is} u_{sj}. \tag{1.2}$$

Ας υποθέσουμε ότι οι πρώτες $(r-1)$ γραμμές των L και U μπορούν να καθορισθούν εξισώνοντας τα στοιχεία των πρώτων $(r-1)$ γραμμών και των δύο μελών της εξίσωσης (1.1). Τότε εξισώνοντας τα στοιχεία στην r γραμμή έχουμε

$$\left.\begin{array}{lcl} l_{r1}u_{11} & = & a_{r1} \\ l_{r1}u_{12} + l_{r2}u_{22} & = & a_{r2} \\ \multicolumn{3}{c}{\dotfill} \\ l_{r1}u_{r1} + l_{r2}u_{2r} + \ldots + l_{rr}u_{rr} & = & a_{rr} \end{array}\right\} \tag{1.3}$$

$$\left.\begin{array}{lclclclcl} l_{r1}u_{1,r+1} & + & l_{r2}u_{2,r+1} & + & \ldots & + & l_{rr}u_{r,r+1} & = & a_{r,r+1} \\ \multicolumn{9}{c}{\dotfill} \\ l_{r1}u_{1n} & + & l_{r2}u_{2n} & + & \ldots & + & l_{rr}u_{rn} & = & a_{rn} \\ l_{r1}c_{1} & + & l_{r2}c_{2} & + & \ldots & + & l_{rr}c_{r} & = & b_{r} \end{array}\right\} \tag{1.4}$$

Από τις εξισώσεις 1 έως $(r-1)$ των σχέσεων (4.3) καθορίζονται μοναδικά τα στοιχεία $l_{r1}, l_{r2}, \ldots, l_{r,r-1}$. Εάν το στοιχείο l_{rr} επιλεγεί αυθαίρετα, η r εξίσωση καθορίζει το u_{rr}. Οι υπόλοιπες εξισώσεις καθορίζουν μοναδικά τα στοιχεία $u_{r,r+1}$ έως u_{rn}. Το αποτέλεσμα αυτό είναι προφανές για τα στοιχεία της 1ης γραμμής και επομένως είναι αληθές γενικά.

Παρατηρούμε ότι το γινόμενο $l_{rr}u_{rr}$ καθορίζεται μοναδικά αλλά ή το l_{rr} ή το u_{rr} θα πρέπει να επιλεγεί αυθαίρετα. Εάν θέλουμε ο L να είναι και μοναδιαίος κάτω τριγωνικός τότε $l_{rr} = 1$. Στην περίπτωση αυτή, οι μόνες διαιρέσεις που περιέχονται είναι αυτές στις οποίες καθορίζονται τα l_{ri} $(i = 1, \ldots, r-1)$ και οι διαιρέτες είναι τα u_{ii}. Η παραγοντοποίηση αυτή δεν μπορεί να αποτύχει εάν $u_{ii} \neq 0$, και τότε είναι μοναδική.

Στην παραπάνω διαδικασία τα στοιχεία καθορίζονται με την εξής σειρά:

Πρώτη γραμμή του U, δεύτερη γραμμή του L
δεύτερη γραμμή του U, τρίτη γραμμή του L κ.ο.κ

ή

Πρώτη γραμμή του U, πρώτη στήλη του L
δεύτερη γραμμή του U, δεύτερη στήλη του L κ.ο.κ

1.1.1 Απαλοιφή Gauss και τριγωνική διαχώριση

Έχουμε αποδείξει ότι εάν ο πίνακας A είναι μη ιδιάζων, τότε η παραγοντοποίηση LU του A εάν υπάρχει είναι μοναδική και επομένως οι πίνακες L και U εάν προσδιορισθούν με τη μέθοδο της τριγωνικής διαχώρισης, θα είναι ίδιοι με τους πίνακες L_1^{-1} και $A^{(n-1)}$ που προκύπτουν από τη μέθοδο των μετασχηματισμών Gauss.
Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε τον καθορισμό του l_{r4} από τη σχέση

$$l_{r4} = (a_{r4} - l_{r1}u_{14} - l_{r2}u_{24} - l_{r3}u_{34})/u_{44}. \tag{1.5}$$

Μια σύγκριση με τους μετασχηματισμούς Gauss μας δείχνει ότι

$$\begin{aligned}
a_{r4}^{(0)} &= a_{r4},\\
a_{r4}^{(1)} &= a_{r4} - l_{r1}u_{14},\\
a_{r4}^{(2)} &= a_{r4} - l_{r1}u_{14} - l_{r2}u_{24},\\
a_{r4}^{(3)} &= a_{r4} - l_{r1}u_{14} - l_{r2}u_{24} - l_{r3}u_{34}
\end{aligned}$$

και επομένως καθορίζοντας τον αριθμητή της (4.5) βρίσκουμε με τη σειρά κάθε ένα από τα στοιχεία στις $(r, 4)$ θέσεις των πινάκων $A^{(1)}, A^{(2)}, A^{(3)}$. Παρόμοια σχόλια ισχύουν και για τον υπολογισμό των στοιχείων του U.

Άσκηση Να προσδιοριστεί η παραγοντοποίηση LU του πίνακα

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}.$$

με τους ακόλουθους τρόπους
1) Με μετασχηματισμούς: Gauss, 2) Με τη μέθοδο Doolittle. Να αποδειχθεί ότι οι δύο μέθοδοι παράγουν ακριβώς την ίδια παραγοντοποίηση. Να γενικεύσετε την απόδειξη για πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

1.2 Ειδικές μορφές πινάκων

Μη τετραγωνικοί πίνακες
Σε πολλές εφαρμογές, όπως π.χ. σε προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων, χρειάζεται η παραγοντοποίηση ενός πίνακα A διάστασης $m \times n$. Οι δυνατές block μορφές που

μπορεί να έχει ένας τέτοιος πίνακας είναι :

$$A = \begin{cases} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \end{pmatrix}, & \text{εάν } m > n,\ A_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}, \\ \\ \begin{pmatrix} A_1 & A_2 \end{pmatrix}, & \text{εάν } m \le n,\ A_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}. \end{cases}$$

Σε αυτές τις περιπτώσεις, είναι σημαντικό να προσδιορίζουμε την **τάξη** (rank) του πίνακα. Ως γνωστόν, η τάξη ενός πίνακα δηλώνει το πλήθος των γραμμικά ανεξάρτητων γραμμών ή στηλών του πίνακα και είναι καθοριστική για τη μορφή της παραγοντοποίησης που μπορεί να έχει ένας μη τετραγωνικός πίνακας.

Ορισμός: Έστω $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Ο πίνακας είναι **πλήρους τάξης** (full rank) εάν για $m > n \Rightarrow \text{rank}(A) = n$, ενώ εάν $m \le n \Rightarrow \text{rank}(A) = m$. Σε κάθε άλλη περίπτωση, η τάξη του πίνακα θα ισούται με $r \le \min\{m, n\}$. Ο πίνακας τότε είναι **ελλιπούς τάξης** (rank deficient).

Παραγοντοποίηση LU σε μη τετραγωνικό πίνακα
Έστω $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Η παραγοντοποίηση LU υπάρχει, εάν όλες οι κύριες $k \times k$ υποορίζουσες του πίνακα είναι διάφορες του μηδενός για $k = 1, 2, \ldots, min\{m, n\}$). Η παραγοντοποίηση έχει τη μορφή $A = LU$, όπου $L \in \mathbb{R}^{m\times m}$ κάτω τριγωνικός με μονάδες στη διαγώνιο και εάν $U_1 \in \mathbb{R}^{k\times k}$ άνω τριγωνικός πίνακας, τότε ο πίνακας $U \in \mathbb{R}^{m\times n}$ είναι της μορφής:

$$U = \begin{cases} \begin{pmatrix} U_1 \\ 0 \end{pmatrix}, & \text{εάν } m > n, \\ \\ \begin{pmatrix} U_1 & U_2 \end{pmatrix}, & \text{εάν } m \le n. \end{cases}$$

Παράδειγμα 1.2.1.

Έστω $A \in \mathbb{R}^{3\times 2}$, $\text{rank}(A) = 2$, πίνακας πλήρους τάξης. Η παραγοντοποίηση LU έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \\ 5 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 0 \\ 5 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & -2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Έστω $A \in \mathbb{R}^{3\times 2}$, $\text{rank}(A) = 1$, πίνακας ελλιπούς τάξης. Η παραγοντοποίηση LU έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \\ 3 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Έστω $A \in \mathbb{R}^{2\times 3}$, $\mathrm{rank}(A) = 2$, πίνακας πλήρους τάξης. Η παραγοντοποίηση LU έχει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -3 & -6 \end{pmatrix}.$$

□

Αποφυγή της μερικής οδήγησης

Σε ορισμένες κατηγορίες πινάκων δεν χρειάζεται να εφαρμοσθεί η τεχνική της μερικής οδήγησης. Αυτό συμβαίνει όταν οι πίνακες είναι αυστηρά διαγώνια υπέρτεροι.

Ορισμός: Ένας πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι **διαγώνια υπέρτερος** εάν

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \;\; i = 1, \ldots, n.$$

Στην περίπτωση που ισχύει αυστηρά η ανισότητα ο πίνακας λέγεται **αυστηρά διαγώνια υπέρτερος**.

Θεώρημα 1.2.1. *Εάν A^T είναι διαγώνια υπέρτερος τότε ο A έχει LU παραγοντοποίηση και $|l_{ij}| \leq 1$.*

Απόδειξη. Διαχωρίζουμε τον A ως εξής:

$$A = \begin{pmatrix} a & w^T \\ v & C \end{pmatrix},$$

όπου a είναι 1×1 και, λόγω της αρχικής ιδιότητας, a είναι το μέγιστο στοιχείο της $[a \;\; v]^t$. Μετά από το πρώτο βήμα της παραγοντοποίησης LU προκύπτει η επόμενη παραγοντοποίηση:

$$\begin{pmatrix} a & w^T \\ v & C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{v}{a} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & C - \frac{vw^T}{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & w^T \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

(Το θεώρημα θα προκύψει από επαγωγή ως προς n)
Θέτουμε $B = C - \frac{vw^T}{a}$. Τότε ο B^T είναι διαγώνια υπέρτερος.
Πράγματι,

$$\sum_{i=1}^{n-1} |b_{ij}| = \sum_{i=1}^{n-1} |c_{ij} - v_i w_j/\alpha| \leq \sum_{i=1}^{n-1} |c_{ij}| + \frac{|w_j|}{|\alpha|} \sum_{i=1}^{n-1} |v_i|$$

$$\leq (|c_{jj}| - |w_j|) + \frac{|w_j|}{|a|}(|a| - |v_j|)$$
$$\leq |c_{jj} - \frac{w_j v_j}{a}| = |b_{jj}|.$$

Τελικά $B = L_1 U_1$, οπότε

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \frac{v}{a} & L_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & w^T \\ 0 & v_1 \end{pmatrix} \equiv LU.$$

□

Θεώρημα 1.2.2. *Εάν όλες οι κύριες υποορίζουσες του $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι μη ιδιάζουσες, τότε υπάρχουν μοναδικοί κάτω και άνω τριγωνικοί πίνακες L και U_1 με μονάδες στη διαγώνιο, και ένας μοναδικός διαγώνιος πίνακας $D = diag(d_1, \dots, d_n)$ έτσι ώστε $A = LDU_1$.*

Απόδειξη. Ως γνωστόν, ο A έχει LU παραγοντοποίηση, $A = LU$. Θέτουμε $D = \mathrm{diag}(d_1, \dots, d_n)$ με $d_i = u_{ii}$, $i = 1, 2, \dots, n$. Τότε ο D είναι μη ιδιάζων και ο πίνακας $U_1 = D^{-1}U$ είναι άνω τριγωνικός με μονάδες στη διαγώνιο. Έτσι $A = LU = LD(D^{-1}U) = LDU_1$.
Η μοναδικότητα προκύπτει από τη μοναδικότητα της LU. □

Παράδειγμα 1.2.2.

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 10 & 20 \\ 20 & 25 & 40 \\ 30 & 50 & 61 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

□

Σε πολλές εφαρμογές, εμφανίζονται τετραγωνικοί πίνακες των οποίων τα στοιχεία τους είναι συμμετρικά ως προς την κύρια διαγώνιο του πίνακα.

Ορισμός: Ένας πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ λέγεται **συμμετρικός**, εάν $A = A^T$.

Θεώρημα 1.2.3. *Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, συμμετρικός. Τότε έχει την παραγοντοποίηση $A = LDL^T$.*

Απόδειξη. Έχουμε ότι $A = LU$ και επιπρόσθετα ο A είναι συμμετρικός. Επομένως ο πίνακας $L^{-1}AL^{-T} = UL^{-T}$ είναι συμμετρικός και άνω τριγωνικός, άρα διαγώνιος και έστω ότι ισούται με D. Τότε $L^{-1}AL^{-T} = D$, οπότε προκύπτει η παραγοντοποίηση $A = LDL^T$. □

Παράδειγμα 1.2.3.

$$A = \begin{pmatrix} 10 & 20 & 30 \\ 20 & 45 & 80 \\ 30 & 80 & 17 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 10 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 4 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Τριγωνική διαχώριση τριδιαγώνιου πίνακα

Σε πολλές εφαρμογές, εμφανίζονται πίνακες των οποίων τα μη μηδενικά στοιχεία βρίσκονται σε συγκεκριμένες θέσεις, συνήθως στη διαγώνιο και σε κάποιο εύρος γύρω από αυτήν.

Ορισμός: Ένας πίνακας $A = [a_{ij}] \in \mathbb{R}^{n\times n}$ λέγεται **τριδιαγώνιος**, εάν $a_{ij} = 0, \;\; \forall \;\; |i-j| > 1, \;\; i, j = 1, 2, \ldots, n.$

Λόγω της ειδικής δομής του τριδιαγώνιου πίνακα, η παραγοντοποίηση Doolitle θα πάρει την ακόλουθη μορφή:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_{32} & a_{33} & a_{34} & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a_{43} & a_{44} & a_{45} & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{n-2\ n-1} & a_{n-1\ n-1} & a_{n+1\ n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n\ n-1} & a_{nn} \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21}u_{11} & l_{21}u_{12} + u_{22} & l_{21}u_{13} + u_{23} & & \\ l_{31}u_{11} & l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} & l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33} & & \\ \vdots & & & & \\ l_{n1}u_{11} & & & & \end{pmatrix}.$$

Παρατηρούμε ότι :

$$u_{11} = a_{11}, \;\; u_{12} = a_{12}$$

$$u_{1j} = 0, \quad j \geq 3$$

και

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}}$$

$$l_{i1} = 0, \quad i \geq 3$$

$\Rightarrow$ Ο πίνακας L είναι κάτω διδιαγώνιος και ο U είναι άνω διδιαγώνιος .
Ο υπολογισμός των στοιχείων τους θα γίνεται ως εξής:
1η γραμμή του U: $u_{11} = a_{11}, \quad u_{12} = a_{12}$
1η στήλη του L : $l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}}$
2η γραμμή του U : $u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}, \quad u_{23} = a_{23}$
2η στήλη του L : $l_{32} = \frac{a_{32}}{u_{22}}$

Οι παραπάνω σχέσεις γενικεύονται στον ακόλουθο αλγόριθμο, ο οποίος υπολογίζει την τριγωνική παραγοντοποίηση ενός δοσμένου τριδιαγώνιου πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Αλγόριθμος $Triag$

for $i = 1, 2, ..., n$
  $u_{ii} = a_{ii} - l_{i,i-1} \cdot u_{i-1,i} \quad \longleftarrow 1flop$
  $u_{i,i+1} = a_{i,i+1}$
  $l_{i+1,i} = \frac{a_{i+1,i}}{u_{ii}} \quad \longleftarrow 1flop$
end

Πολυπλοκότητα:
Δεδομένου ότι κάθε βήμα της επανάληψης απαιτεί περίπου 1 flop, η πολυπλοκότητα του αλγορίθμου είναι γραμμική, δηλαδή της τάξεως $O(2n)$.

Παράδειγμα 1.2.4. *Να προσδιορισθεί η παραγοντοποίηση LU του πίνακα*

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{pmatrix}.$$

Παρατηρούμε ότι ο πίνακας A είναι τριδιαγώνιος. Επομένως θα έχει παραγοντοποίηση $A = LU$, όπου

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4/15 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 15/56 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 15/4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 56/15 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 209/56 \end{pmatrix}.$$

□

Παρατήρηση: Είναι σημαντικό για τον προσδιορισμό της παραγοντοποίησης ενός πίνακα να λαμβάνεται υπ'όψη η δομή του και ανάλογα να προσαρμόζεται ο τυχών υπάρχων γενικός αλγόριθμος. Έτσι, επιτυγχάνεται πάντα η βέλτιστη δυνατή πολυπλοκότητα. Συγκεκριμένα, για τον υπολογισμό της παραγοντοποίησης LU ενός τριδιαγώνιου πίνακα δεν εφαρμόζουμε απ'ευθείας τον αλγόριθμο της τριγωνικής διαχώρισης, που είναι κυβικής πολυπλοκότητας, αλλά την προσαρμοσμένη σε τριδιαγώνιο πίνακα μορφή του αλγορίθμου, που είναι γραμμική.

1.3 Παραγοντοποίηση Cholesky

Οι συμμετρικοί πίνακες αξίζουν ιδιαίτερης προσοχής δεδομένου ότι χαρακτηρίζονται από πολύ ωραίες μαθηματικές ιδιότητες. Όλες οι ιδιοτιμές τους είναι πραγματικές με αντίστοιχα ορθογώνια ιδιοδιανύσματα. Επιπρόσθετα, ορισμένοι συμμετρικοί πίνακες έχουν ακόμα μία πιο δυνατή ιδιότητα που τους ταξινομεί στην κορυφή των εφαρμοσμένων μαθηματικών, Η επιπλέον αυτή ιδιότητα ορίζεται ως ακολούθως.

Ορισμός: Ο πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ λέγεται **θετικά ορισμένος**, εάν
$x^TAx > 0,\ \forall\ x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0.$

Οι θετικά ορισμένοι πίνακες έχουν την ακόλουθη πολύ χρήσιμη παραγοντοποίηση.

Θεώρημα 1.3.1. *Έστω $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ συμμετρικός, θετικά ορισμένος πίνακας. Τότε υπάρχει ένας μοναδικός άνω τριγωνικός πίνακας $G \in \mathbb{R}^{n\times n}$ με θετικά διαγώνια στοιχεία έτσι ώστε:*

$$A = G^TG.$$

Απόδειξη.
Ύπαρξη: Θα χρησιμοποιήσουμε επαγωγή ως προς n. Έστω λοιπόν ότι υπάρχει η ανάλυση Cholesky για θετικά ορισμένους πίνακες $(n-1)\times(n-1)$. Τότε ο πίνακας A μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$A = \begin{pmatrix} A_{n-1} & c \\ c^T & a_{nn} \end{pmatrix},\quad A_{n-1} = G_{n-1}^TG_{n-1},\quad G_{n-1}\ \text{μοναδικός},\ c \in \mathbb{R}^{n-1}.$$

Ορίζουμε τον πίνακα G ως:

$$G = \begin{pmatrix} G_{n-1} & b \\ 0^T & \sqrt{k} \end{pmatrix},\quad \text{όπου}\ b = (G_{n-1}^T)^{-1}c\ \ \text{και}\ \ k = a_{nn} - b^\top b,$$

τότε $k = a_{nn} - c^TA_{n-1}^{-1}c > 0$ και ο πίνακας A μπορεί να γραφεί στη μορφή $A = G^TG$.

Μοναδικότητα του πίνακα G: Αφού $G = \begin{pmatrix} G_{n-1} & b \\ 0^T & \sqrt{k} \end{pmatrix}$ και $G^T G = A = \begin{pmatrix} A_{n-1} & c \\ c^T & a_{nn} \end{pmatrix}$ έπεται ότι $G_{n-1}^T G_{n-1} = A_{n-1}$, όπου ο G_{n-1} είναι μοναδικός. Επίσης έχουμε

$$G_{n-1}^T b = c,\ b^T b + k = a_{nn}$$

και άρα τα b και k είναι μοναδικά.
Άρα το θεώρημα ισχύει για κάθε n. □

Πόρισμα 1.3.1. *Αν $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, θετικά ορισμένος πίνακας τότε $\det(A) > 0$ και επομένως ο πίνακας είναι μη ιδιάζων.*

Απόδειξη. Πράγματι, αν G είναι ο παράγοντας Cholesky του θετικά ορισμένου πίνακα A, θα ισχύει: $A = G^T G$. Τότε όμως $\det(A) = \det(G^T G) = \det(G^T)\det(G) = \det(G)\det(G) = \det(G)^2 > 0$, αφού $\det(G^T) = \det(G)$.

□

Παρατήρηση: Ο πίνακας G ονομάζεται παράγοντας Cholesky του δοσμένου πίνακα A. Ισοδύναμα, μπορούμε να ορίσουμε την παραγοντοποίηση Cholesky και στη μορφή $A = H\cdot H^T$, όπου H μοναδικός κάτω τριγωνικός πίνακας με θετικά διαγώνια στοιχεία.

Προσδιορισμός του παράγοντα Cholesky

Ο προσδιορισμός του παράγοντα Cholesky μπορεί να προκύψει με μία απ'ευθείας εξίσωση των στοιχείων του αρχικού πίνακα με τα στοιχεία του γινομένου της παραγοντοποίησης. Ας εξετάσουμε πρώτα την περίπτωση $n = 3$. Σύμφωνα με το θεώρημα παραγοντοποίησης Cholesky, εάν H είναι ο παράγοντας Cholesky του A θα έχουμε:

$$H = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 \\ h_{21} & h_{22} & 0 \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix},\ h_{11}, h_{22}, h_{33} > 0$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 \\ h_{21} & h_{22} & 0 \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{21} & h_{31} \\ 0 & h_{22} & h_{32} \\ 0 & 0 & h_{33} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} {h_{11}}^2 & h_{11}h_{21} & h_{11}h_{31} \\ h_{21}h_{11} & {h_{21}}^2 + {h_{22}}^2 & h_{21}h_{31} + h_{22}h_{32} \\ h_{31}h_{11} & h_{31}h_{21} + h_{32}h_{22} & {h_{31}}^2 + {h_{32}}^2 + {h_{33}}^2 \end{bmatrix}.$$

Εξισώνοντας τα αντίστοιχα στοιχεία έχουμε:

$$\left.\begin{array}{cc} {h_{11}}^2 = a_{11} & {h_{21}}^2 + {h_{22}}^2 = a_{22} \\ h_{11}h_{21} = a_{12} & h_{21}h_{31} + h_{22}h_{32} = a_{23} \\ h_{11}h_{31} = a_{13} & {h_{31}}^2 + {h_{32}}^2 + {h_{33}}^2 = a_{33} \end{array}\right\} \begin{array}{cc} h_{11} = \sqrt{a_{11}} & h_{22} = \sqrt{a_{22} - \frac{{a_{12}}^2}{a_{11}}} \\ h_{21} = \frac{a_{12}}{\sqrt{a_{11}}} & h_{32} = \frac{a_{32} - h_{21}h_{31}}{h_{22}} \\ h_{31} = \frac{a_{13}}{\sqrt{a_{11}}} & h_{33} = \sqrt{a_{33} - {h_{31}}^2 - {h_{32}}^2} \end{array}$$

Παρατηρούμε ότι προκύπτουν οι ακόλουθοι τύποι γενικοί τύποι.
$h_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} {h_{jk}}^2}$,

$h_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} h_{ik}h_{jk})/h_{jj},\ i = j+1, \ldots, n$,

$h_{ij} = 0,\ i < j$.

Θεωρούμε τώρα τη γενική περίπτωση. Έστω πίνακας $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ συμμετρικός θετικά ορισμένος πίνακας. Τότε ο A γράφεται ως εξής:

$$A = HH^T,$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & 0 & \ldots & 0 \\ h_{21} & h_{22} & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & \ldots & h_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & \ldots & h_{1n} \\ 0 & h_{22} & \ldots & h_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & h_{nn} \end{pmatrix},$$

όπου

$$h_{11} = \sqrt{a_{11}},\ \ h_{i1} = \frac{a_{i1}}{h_{11}},\ \ i = 1, \ldots, n,$$

$$\sum_{k=1}^{i} h_{ik}^2 = a_{ii},\ \ a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} h_{ik}h_{jk},\ \ j < i.$$

Από τα παραπάνω, προκύπτει ο αλγόριθμος Cholesky κατά γραμμές.

Αλγόριθμος Cholesky:
Δοθέντος ενός $n \times n$ συμμετρικού και θετικά ορισμένου πίνακα A, ο παρακάτω αλγόριθμος υπολογίζει τον παράγοντα Cholesky H. Ο πίνακας H υπολογίζεται γραμμή-γραμμή και αποθηκεύεται στο κάτω τριγωνικό τμήμα του πίνακα A.

for $k = 1, 2, \ldots, n$ do
  for $i = 1, 2, \ldots, k-1$ do
    $a_{ki} = h_{ki} = \frac{1}{h_{ii}}\left(a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-1} h_{ij}h_{kj}\right) \qquad \longleftarrow i \ flops$
  $a_{kk} = h_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} h_{kj}^2} \qquad \longleftarrow k \ flops$

Πολυπλοκότητα:

Ο συνολικός αριθμός των flops που απαιτούνται για τον αλγόριθμο Cholesky προσδιορίζεται ως εξής:

$$\sum_{k=1}^{n}\left\{\sum_{i=1}^{k-1} i\right\}+\sum_{k=1}^{n} k=\sum_{k=1}^{n}\frac{k(k-1)}{2}+\sum_{k=1}^{n} k=\frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} k^2=$$
$$=\frac{1}{2}\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}\approx O\left(\frac{n^3}{6}\right)\text{ flops.}$$

Επιπλέον χρειάζεται και ο υπολογισμός $O(n)$ τετραγωνικών ριζών.

Κριτήριο ελέγχου της ιδιότητας ‘‘θετικά ορισμένος’’

Δοθέντος ενός πίνακα A είναι αδύνατον να αποφανθούμε εάν είναι θετικά ορισμένος ακολουθώντας τον θεωρητικό ορισμό, ο οποίος μπορεί να φανεί χρήσιμος μόνο για τον εντοπισμό αντιπαραδείγματος το οποίο θα μας οδηγήσει σε απόρριψη της ιδιότητας. Η μέθοδος Cholesky παρέχει ένα κριτήριο ελέγχου για το εάν ένας πίνακας A είναι ή όχι θετικά ορισμένος.
Σύμφωνα με το θεώρημα ανάλυσης Cholesky, αν ο A είναι θετικά ορισμένος τότε και μόνον τότε υπάρχει πίνακας H κάτω τριγωνικός με θετικά στοιχεία στην κύρια διαγώνιο, έτσι ώστε $A = HH^T$. Έτσι, για να διαπιστώσουμε αν ένας συμμετρικός πίνακας A είναι και θετικά ορισμένος, αρχίζουμε να υπολογίζουμε τα στοιχεία του πίνακα H (παράγοντας Cholesky) του A, και εάν κατά τον υπολογισμό των h_{ii} προκύψει υπόριζο αρνητικό ή μηδέν, τότε ο A δεν είναι θετικά ορισμένος.

Παράδειγμα 1.3.1. *Να εξετάσετε εάν είναι θετικά ορισμένος ο συμμετρικός πίνακας*

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 3\\ 2 & 5 & 10\\ 3 & 10 & 16\end{bmatrix}.$$

Απόδειξη. Έστω $H=\begin{bmatrix}h_{11} & 0 & 0\\ h_{21} & h_{22} & 0\\ h_{31} & h_{32} & h_{33}\end{bmatrix}$ ο παράγοντας Cholesky του A. Ισχύει η ακόλουθη σχέση:

$$HH^T=\begin{bmatrix}h_{11} & 0 & 0\\ h_{21} & h_{22} & 0\\ h_{31} & h_{32} & h_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}h_{11} & h_{21} & h_{31}\\ 0 & h_{22} & h_{32}\\ 0 & 0 & h_{33}\end{bmatrix}=$$

$$\begin{bmatrix}{h_{11}}^2 & h_{11}h_{21} & h_{11}h_{31}\\ h_{21}h_{11} & {h_{21}}^2+{h_{22}}^2 & h_{21}h_{31}+h_{22}h_{32}\\ h_{31}h_{11} & h_{31}h_{21}+h_{32}h_{22} & {h_{31}}^2+{h_{32}}^2+{h_{33}}^2\end{bmatrix}=A.$$

Εξισώνοντας τα στοιχεία των πινάκων HH^T και A προκύπτει:

$$\left.\begin{array}{c} {h_{11}}^2 = 1 \\ h_{11}h_{21} = 2 \\ h_{11}h_{31} = 3 \\ {h_{21}}^2 + {h_{22}}^2 = 5 \\ h_{21}h_{31} + h_{22}h_{32} = 10 \\ {h_{31}}^2 + {h_{32}}^2 + {h_{33}}^2 = 16 \end{array}\right\} \quad \begin{array}{c} h_{11} = 1 \\ h_{21} = 2 \\ h_{31} = 3 \\ h_{22} = 1 \\ h_{32} = 4 \\ h_{33} = -9 < 0 \end{array}$$

Συνεπώς ο πίνακας A δεν είναι θετικά ορισμένος. □

Συνοπτικός Πίνακας

Παραγοντοποιήσεις

ΠΙΝΑΚΑΣ	ΙΔΙΟΤΗΤΑ	ΠΑΡΑΓΟΝΤΟΠΟΙΗΣΗ
$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$	Όλες οι κύριες υποορίζουσές του $\neq 0$	**μοναδική:** $A = LU$ L: κάτω τριγωνικός με μοναδιαία διαγώνιο U: άνω τριγωνικός (παραγοντοποίηση Doolitle) ——— L: κάτω τριγωνικός U: άνω τριγωνικός με μοναδιαία διαγώνιο (παραγοντοποίηση Crout) ——— **μοναδική:** $A = LDU$ L, U: κάτω και άνω τριγωνικοί με μοναδιαία διαγώνιο D: διαγώνιος πίνακας
$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$	Συμμετρικός και όλες οι κύριες υποορίζουσές του $\neq 0$	**μοναδική:** $A = LDL^T$ L: κάτω τριγωνικός με μοναδιαία διαγώνιο D: διαγώνιος
$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$	Συμμετρικός και θετικά ορισμένος	**μοναδική:** $A = G^TG$ G άνω τριγωνικός με θετικά διαγώνια στοιχεία (παραγοντοποίηση Cholesky)

1.4 Ασκήσεις

Άσκηση 1
Έστω $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ αντιστρέψιμος. Να αποδείξετε ότι ο A έχει μοναδική παραγοντοποίηση της μορφής $A = LU$, όπου $L = (\ell_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ κάτω τριγωνικός πίνακας και $U = (u_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ άνω τριγωνικός πίνακας. Να προσδιορίσετε αναλυτικά τα στοιχεία ℓ_{ij}, u_{ij}. Στη συνέχεια, να διατυπώσετε αλγόριθμο προσδιορισμού των στοιχείων των πινάκων L και U δοθέντος του πίνακα A. Να εκτιμηθεί το κόστος των απαιτούμενων πράξεων.

Λύση. Θα προσδιορίσουμε τα στοιχεία των πινάκων L, U και θα βρούμε έναν αλγόριθμο υπολογισμού τους. Υποθέτουμε ότι ο πίνακας A μπορεί να γραφεί ως $A = LU$, όπου οι L, U ικανοποιούν τις υποθέσεις της εκφώνησης. Τότε

$$a_{ij} \;=\; \sum_{s=1}^{\min\{i,j\}} \ell_{is}u_{sj}, \tag{1.6}$$

διότι $\ell_{is} = 0$ (αντ. $u_{sj} = 0$) για κάθε $s > i$ (αντ. $s > j$) αντίστοιχα.
Υποθέτουμε ότι έχουμε υπολογίσει τις $k-1$ πρώτες γραμμές (αντ. στήλες) των U (αντ. L) και θέλουμε να προσδιορίσουμε τις αμέσως επόμενες. Για $i = j$ η Εξίσωση (1.6) γίνεται

$$a_{kk} \;=\; \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}u_{sk} + \ell_{kk}u_{kk}. \tag{1.7}$$

Επιλέγοντας αυθαίρετα ένα εκ των ℓ_{kk}, u_{kk} από την Εξίσωση (1.7) μπορούμε να προσδιορίσουμε το άλλο. Τώρα, για τον υπολογισμό της k γραμμής του U θέτοντας $i = k$ ο παραπάνω τύπος γίνεται

$$a_{kj} \;=\; \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}u_{sj} + \ell_{kk}u_{kj}, \tag{1.8}$$

για κάθε $k+1 \le j \le n$, ενώ για τον υπολογισμό της k στήλης του L θέτοντας $j = k$ ο παραπάνω τύπος γίνεται

$$a_{ik} \;=\; \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{is}u_{sk} + \ell_{ik}u_{kk} \tag{1.9}$$

για κάθε $k+1 \le i \le n$. Άρα, αν τα ℓ_{kk}, u_{kk} έχουν επιλεγεί μη μηδενικά, οι Εξισώσεις (4.10) και (4.11) προσδιορίζουν τα στοιχεία u_{kj} και ℓ_{ik} των πινάκων U και L, αντίστοιχα.

Ένας αλγόριθμος προσδιορισμού τους είναι ο εξής:

input n, a_{ij}
for $i = 1, 2, \ldots, n$
  προσδιορίζω μια (μη μηδενική) τιμή για ένα εκ των ℓ_{kk}, u_{kk}
  και υπολογίζω το άλλο από τον τύπο $\ell_{kk}u_{kk} = a_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}u_{sk}$
  for $j = i+1, i+2, \ldots, n$
    $u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{s=1}^{i-1} \ell_{is}u_{sj})/\ell_{ii}$ $\longleftarrow i\ flops$
    $\ell_{ji} = (a_{ji} - \sum_{s=1}^{i-1} \ell_{js}u_{si})/u_{ii}$ $\longleftarrow i\ flops$
  end
end
output ℓ_{ij}, u_{ij}

Για τον υπολογισμό του κόστους των απαιτούμενων πράξεων έχουμε

$$2\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=i+1}^{n} 2(n-i) = \sum_{i=1}^{n} 2i(n-i) = 2\{\sum_{i=1}^{n} ni - \sum_{i=1}^{n} i^2\} \approx O(\frac{n^3}{3}).$$

Θα δείξουμε επαγωγικά ότι αν κάθε $k \times k$ πάνω αριστερά block του A είναι αντιστρέψιμο, τότε έχει τη ζητούμενη παραγοντοποίηση με τον L να έχει 1 στην κύρια διαγώνιο. Για $k = 1$ έχουμε $a_{11} = \ell_{11}u_{11}$ και αφού $\ell_{11} = 1$, έχουμε $u_{11} = a_{11}$. Η Εξίσωση (4.10) μας πληροφορεί ότι

$$A_{k-1} \ = \ L_{k-1}U_{k-1}, \tag{1.10}$$

όπου για $n \times n$ πίνακα B, συμβολίζουμε με B_k το $k \times k$ πάνω αριστερά block του. Από την υπόθεση ο A_{k-1} είναι αντιστρέψιμος και γι΄ αυτό από την Εξίσωση (1.10) έπεται ότι και οι L_{k-1}, U_{k-1} είναι αντιστρέψιμοι. Επειδή ο L_{k-1} είναι αντιστρέψιμος, μπορούμε να λύσουμε το σύστημα

$$\sum_{s=1}^{k-1} \ell_{is}u_{sk} \ = \ a_{ik}$$

ως προς u_{sk} με $1 \le s \le k-1$. Αυτά θα είναι τα στοιχεία της k στήλης του U. Επειδή ο U_{k-1} είναι αντιστρέψιμος, μπορούμε να λύσουμε το σύστημα

$$\sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}u_{si} \ = \ a_{kj}$$

ως προς ℓ_{ks} με $1 \le s \le k-1$. Αυτά θα είναι τα στοιχεία της k γραμμής του L. Τέλος, από τον τύπο

$$a_{kk} \ = \ \sum_{s=1}^{k} \ell_{ks}u_{sk} \ = \ \sum_{s=1}^{k-1} \ell_{ks}u_{sk} + u_{kk}$$

μπορούμε να υπολογίσουμε τα u_{kk}, αφού $\ell_{kk} = 1$. Συνεπώς, έχουμε όλα τα στοιχεία των L, U.
Θα δείξουμε ότι αν ο πίνακας A έχει τέτοια παραγοντοποίηση ώστε ο πίνακας L να έχει 1 στην κύρια διαγώνιο, τότε αυτή είναι μοναδική. Πράγματι, έστω

$$A \;=\; L_1U_1 \;=\; L_2U_2$$

δύο τέτοιες παραγοντοποιήσεις. Οι πίνακες U_i, L_i είναι αντιστρέψιμοι, επειδή έχουν μη μηδενικά στοιχεία στη διαγώνιο και επομένως

$$L_2^{-1}L_1 \;=\; U_1^{-1}U_2. \tag{1.11}$$

Επειδή το γινόμενο δύο άνω (αντ. κάτω) τριγωνικών πινάκων είναι άνω (αντ. κάτω) τριγωνικός πίνακας, άρα έπεται ότι έχουμε ισότητα μεταξύ ενός άνω τριγωνικού και ενός κάτω τριγωνικού πίνακα. Συνεπώς, επειδή οι L_i έχουν 1 στην κύρια διαγώνιο έχουμε $L_2^{-1}L_1 = I_n$ και γι' αυτό $L_1 = L_2$, όπου I_n είναι ο ταυτοτικός $n \times n$ πίνακας. Από την Εξίσωση (1.11) έπεται ότι και $U_1 = U_2$.

Παράδειγμα: Να προσδιορίσετε τις παραγοντοποιήσεις των παρακάτω πινάκων

$$A \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad B \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & -2 \\ -2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Παρατηρούμε ότι

$$A = LU \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & -8 \end{pmatrix}.$$

$$B = L \cdot U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

$\square$

Άσκηση 2

Έστω $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ αντιστρέψιμος. Να αποδείξετε ότι ο A έχει μοναδική παραγοντοποίηση της μορφής $A = LDU$, όπου $L = (\ell_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ (αντ. $U = (u_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$) κάτω (αντ. άνω) τριγωνικός και $D = \mathrm{diag}(d_i) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ διαγώνιος. Να προσδιορίσετε αναλυτικά τα στοιχεία ℓ_{ij}, u_{ij}, d_i και να διατυπώσετε αλγόριθμο προσδιορισμού των στοιχείων των πινάκων L, U και D δοθέντος του A. Να εκτιμηθεί το κόστος των απαιτούμενων πράξεων.

Λύση. Από την Άσκηση 1 έπεται ότι μπορούμε να γράψουμε τον πίνακα A στη μορφή LU, όπου $L = (\ell_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ (αντ. $U = (u_{ij}) \in \mathbb{R}^{n\times n}$) κάτω (αντ. άνω) τριγωνικός πίνακας. Είδαμε ότι τα στοιχεία της διαγωνίου του U καθορίζονται από την Εξίσωση (4.9). Θέτουμε $d_i = u_{ii}$, για κάθε $1 \le i \le n$ και έχουμε

$$U = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \ldots, d_n)U',$$

όπου $U' \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι άνω τριγωνικός πίνακας με εισόδους

$$u'_{ij} = \begin{cases} \frac{u_{ij}}{u_{ii}}, & \text{αν } i < j \\ 1, & \text{αν } i = j \\ 0, & \text{αν } i > j \end{cases}.$$

Συνεπώς, $A = LDU'$, όπου $D = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \ldots, d_n)$ και αυτή είναι η ζητούμενη παραγοντοποίηση.
Τα στοιχεία των L, U προσδιορίζονται όπως στην Άσκηση 1.
Θα δείξουμε αν ο πίνακας A έχει τέτοια παραγοντοποίηση ώστε ο πίνακας L να έχει μονάδες στην κύρια διαγώνιο, τότε αυτή είναι μοναδική. Πράγματι, έστω

$$A = L_1D_1U_1 = L_2D_2U_2$$

δύο τέτοιες παραγοντοποιήσεις. Όπως είδαμε στην Άσκηση 1, οι πίνακες U_i, L_i είναι αντιστρέψιμοι και επομένως

$$L_2^{-1}L_1D_1 = U_1^{-1}U_2D_2. \tag{1.12}$$

Έχουμε ισότητα μεταξύ ενός κάτω τριγωνικού και ενός άνω τριγωνικού πίνακα (ίδιων διαστάσεων). Οπότε και τα δύο μέλη πρέπει να είναι διαγώνιοι πίνακες με

$$L_2^{-1}L_1D_1 = D_1 \quad \text{και} \quad U_1^{-1}U_2D_2 = D_2.$$

Άρα, από την εξίσωση (1.12) έπεται ότι $D_1 = D_2$.

Ένας αλγόριθμος προσδιορισμού των ℓ_{ij}, d_i, u'_{ij} είναι ο εξής:

input n, a_{ij}
for $i = 1, 2, \ldots, n$ do
    $\ell_{ii} = 1$
    $u_{ii} = a_{ii} - \sum_{s=1}^{i-1} \ell_{is}u_{si}$
    for $j = i+1, i+2, \ldots, n$
        $u_{ij} = a_{ij} - \sum_{s=1}^{i-1} \ell_{is}u_{sj}$
        $\ell_{ji} \leftarrow (a_{ik} - \sum_{s=1}^{i-1} \ell_{is}u_{si})/u_{ii}$
    end
    for $j = k+1, k+2, \ldots, n$
        $u'_{kj} = u_{kj}/u_{kk}$

end
$u'_{kk} = 1$
$d_k = u_{kk}$
end
output ℓ_{ij}, d_i, u'_{ij}

Σχετικά με το πλήθος των πράξεων, έχουμε όσες πράξεις υπολογίστηκαν στην παραγοντοποίηση $A = LU$ και επιπλέον

$$\sum_{i=1}^{n-1} i \;=\; \frac{n(n-1)}{2} \;=\; \frac{n^2}{2} - \frac{n}{2}$$

για τις διαιρέσεις με τα στοιχεία u_{ii}.

Παράδειγμα: Να προσδιορίσετε τις παραγοντοποιήσεις των παρακάτω πινάκων

$$A \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 5 & 4 \\ 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} \quad \text{και} \quad B \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & -2 \\ -2 & 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Παρατηρούμε ότι

$$A = LDU \;=\; \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -8 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & -2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

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

□

Άσκηση 3
Έστω A τριδιαγώνιος πίνακας, δηλαδή $a_{i\,j} = 0$ για κάθε $|i - j| > 1$. Ποια μορφή θα έχει η παραγοντοποίηση $A = LU$; Να προσδιορίσετε αναλυτικά τα στοιχεία $\ell_{i\,j}, u_{i\,j}$ και να διατυπώσετε αλγόριθμο προσδιορισμού εκτιμώντας το πλήθος των απαιτούμενων πράξεων.

Λύση. Αφού ο A είναι τριδιαγώνιος, θα πρέπει και οι πίνακες L και U να είναι ειδικής μορφής. Από την εξίσωση (4.8) της Άσκησης 1 υπολογίζουμε

$$a_{kk} \;=\; \ell_{k\,k-1}u_{k-1\,k} + \ell_{kk}u_{kk}, \tag{1.13}$$

$$a_{k\,k+1} \;=\; \ell_{kk}u_{k\,k+1}, \tag{1.14}$$

$$a_{k+1\,k} \;=\; \ell_{k+1\,k}u_{kk}. \tag{1.15}$$

Παρατηρούμε ότι : $u_{1j} = 0, \quad j \geq 3$ και : $l_{i1} = 0, \quad i \geq 3 \Rightarrow$ Ο πίνακας L είναι κάτω διδιαγώνιος και ο U είναι άνω διδιαγώνιος .

Αν επιλέξουμε αυθαίρετα ένα εκ των ℓ_{kk}, u_{kk}, από την εξίσωση (1.13) της Άσκησης 1 μπορούμε να προσδιορίσουμε το άλλο, και με τις εξισώσεις (1.14) και (1.15) μπορούμε να προσδιορίσουμε την άνω διαγώνιο του U και την κάτω διαγώνιο του L, αντίστοιχα.

Ένας αλγόριθμος προσδιορισμού τους είναι ο εξής:

input $n, a_{i\,j}$
$\ell_{ii} = 1, \ i = 1, 2, \ldots, n$
$u_{i\,i+1} = a_{i\,i+1}, i = 1, 2, \ldots, n-1$
for $k = 2, 3, \ldots, n$
    $\ell_{i\,i-1} = \frac{a_{i\,i-1}}{u_{i-1\,i-1}}$
    $u_{il} = \frac{a_{ii} - \ell_{i\,i-1} u_{i-1\,i}}{\ell_{ii}}$
end
output $\ell_{i,j}, u_{i,j}$

Το πλήθος των πράξεων όταν ο A είναι τριδιαγώνιος είναι $2(n-1) = 2n-2$. □

Άσκηση 4

Έστω
$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},$$
όπου $A_{11} \in \mathbb{R}^{m \times m}, A_{22} \in \mathbb{R}^{p \times p}$ και οι $A_{11}, A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$ είναι αντιστρέψιμοι. Έστω
$$B = \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}$$
ο αντίστροφος του A. Να αποδείξετε ότι
$$\begin{aligned} B_{11} &= A_{11}^{-1} - B_{12}A_{21}A_{11}^{-1}, \quad & B_{12} &= -A_{11}^{-1}A_{12}B_{22}, \\ B_{21} &= -B_{22}A_{21}A_{11}^{-1}, & B_{22} &= (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1}. \end{aligned}$$

- Να καταμετρηθούν οι απαιτούμενες πράξεις για τον υπολογισμό του A^{-1} σύμφωνα με τους παραπάνω τύπους.
- Είναι προτιμότερος ο υπολογισμός του A^{-1} με αυτούς τους τύπους ή με κατ' ευθείαν εφαρμογή του αλγορίθμου Gauss–Jordan;
- Να γίνει εφαρμογή για τον πίνακα
$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 4 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 4 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Λύση. Για θετικούς ακέραιους n, k, ℓ, έστω I_n ο ταυτοτικός $n \times n$ πίνακας και $0_{k\times\ell}$ ο μηδενικός $k \times \ell$ πίνακας. Θέτουμε $S = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$ και παρατηρούμε ότι

$$A = \begin{pmatrix} I_m & 0_{m\times p} \\ A_{21}A_{11}^{-1} & I_p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & 0_{m\times p} \\ 0_{p\times m} & S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & A_{11}^{-1}A_{12} \\ 0_{p\times m} & I_p \end{pmatrix}. \tag{1.16}$$

Όμως, αν Q, R είναι αντιστρέψιμοι πίνακες, τότε $(QR)^{-1} = R^{-1}Q^{-1}$ και επομένως από την εξίσωση (1.16) έπεται ότι

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} A_{11}^{-1} + A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1} \\ -S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & S^{-1}. \end{pmatrix}$$

Εξισώνοντας τα στοιχεία του πίνακα αυτού με τα στοιχεία του B παίρνουμε

$$\begin{aligned} &B_{22} = S^{-1} = (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1}, \\ &B_{21} = -S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} = -B_{22}A_{21}A_{11}^{-1}, \\ &B_{12} = -A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1} = -A_{11}^{-1}A_{12}B_{22}, \\ &B_{11} = A_{11}^{-1} + A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} = A_{11}^{-1} - B_{21}A_{21}A_{11}^{-1}. \end{aligned}$$

Για την καταμέτρηση των απαιτούμενων πράξεων για τον υπολογισμό του A^{-1} σύμφωνα με τους παραπάνω τύπους έχουμε

παράσταση	κόστος υπολογισμού
A_{11}^{-1}	m^3
$A_{21}A_{11}^{-1}$	pm^2
$A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$	mp^2
$A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$	p^2
$(A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1}$	p^3
B_{22}	$m^3 + pm^2 + mp^2 + p^2 + p^3$
A_{11}^{-1}	m^3
$A_{11}^{-1}A_{12}$	m^2p
$A_{11}^{-1}A_{12}B_{22}$	mp^2
B_{12}	$m^3 + m^2p + mp^2$
A_{11}^{-1}	m^3
$A_{21}A_{11}^{-1}$	pm^2
$B_{22}A_{21}A_{11}^{-1}$	p^2m
B_{21}	$m^3 + pm^2 + p^2m$
A_{11}^{-1}	m^3
$A_{21}A_{11}^{-1}$	pm^2
$B_{12}A_{21}A_{11}^{-1}$	m^2
B_{11}	$m^3 + 2pm^2 + m^2$

Συνεπώς, το συνολικό πλήθος των πράξεων είναι

$$4m^3 + 4p^3 + 6m^2p + 3p^2m + p^2 + m^2 \;\approx\; (m+p)^3.$$

Η ίδια πολυπλοκότητα προκύπτει και με χρήση του αλγορίθμου Gauss–Jordan, αλλά η συγκεκριμένη μέθοδος είναι προτιμότερη εάν ο πίνακας A είναι σε block μορφή και γι΄ αυτό σε κάθε βήμα έχουμε να προσδιορίσουμε πίνακες μικρότερων διαστάσεων.

Για την εφαρμογή, θα υπολογίσουμε τον αντίστροφο του A με χρήση της block μορφής στην οποία είναι εκφρασμένος. Έστω

$$A_{11} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}, \qquad A_{12} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix},$$

$$A_{21} = \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_{22} = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 4 \end{pmatrix}.$$

Παρατηρούμε ότι :

$$A_{11}^{-1} = \begin{pmatrix} 1/4 & 0 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix},$$

επομένως

$$B_{22} = (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1} = \begin{pmatrix} 2/7 & -1/28 \\ 0 & 1/4 \end{pmatrix}.$$

Επίσης, έχουμε

$$B_{21} = -B_{22}A_{21}A_{11}^{-1} = \begin{pmatrix} 9/112 & 1/16 \\ 1/14 & 1/14 \end{pmatrix},$$

$$B_{12} = -A_{11}^{-1}A_{12}B_{22} = \begin{pmatrix} 1/14 & 1/14 \\ 1/14 & 1/14 \end{pmatrix},$$

$$B_{11} = A_{11}^{-1} - B_{12}A_{21}A_{11}^{-1} = \begin{pmatrix} 2/7 & 0 \\ 1/28 & 1/4 \end{pmatrix}$$

οπότε ο αντίστροφος του A είναι

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 2/7 & 0 & 1/14 & 1/14 \\ 1/28 & 1/4 & 1/14 & 1/14 \\ 9/112 & 1/16 & 2/7 & -1/28 \\ 1/14 & 1/14 & 0 & 1/4 \end{pmatrix}.$$

□

Άσκηση 5
Έστω ο συμμετρικός και θετικά ορισμένος πίνακας

$$M = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\intercal & C \end{pmatrix},$$

όπου A, C είναι τετραγωνικοί πίνακες. Να δείξετε ότι

$$M^{-1} = \begin{pmatrix} A^{-1} + A^{-1}BS^{-1}B^\intercal A^{-1} & -A^{-1}BS^{-1} \\ -S^{-1}B^\intercal A^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix},$$

όπου $S = C - B^\intercal A^{-1}B$.

Λύση. Ο ζητούμενος αντίστροφος μπορεί να υπολογιστεί με εφαρμογή των τύπων της Άσκησης 4. Θα πρέπει όμως πρώτα να δείξουμε ότι οι πίνακες A, S είναι αντιστρέψιμοι. Από το Πόρισμα 4.5.1 εάν ένας πίνακας είναι θετικά ορισμένος τότε είναι αντιστρέψιμος, επομένως αρκεί να δείξουμε ότι οι πίνακες αυτοί είναι θετικά ορισμένοι.

Υποθέτουμε ότι $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ και $C \in \mathbb{R}^{p\times p}$. Αν $x \in \mathbb{R}^n$ μη τετριμμένο, τότε επειδή ο M είναι θετικά ορισμένος έχουμε

$$0 < \begin{pmatrix} x^\intercal & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^\intercal & C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x^\intercal & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Ax \\ B^\intercal x \end{pmatrix} = x^\intercal Ax$$

και γι αυτό ο A είναι θετικά ορισμένος. Με παρόμοιο τρόπο μπορεί να δείξει κανείς ότι ο C είναι θετικά ορισμένος.

Τότε, για κάθε $y \in \mathbb{R}^p$ μη τετριμμένο έχουμε

$$0 < y^\intercal Cy = y^\intercal Sy + y^\intercal B^\intercal A^{-1}By = y^\intercal Sy + (By)^\intercal A^{-1}(By) < y^\intercal Sy,$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την ταυτότητα $(By)^\intercal = y^\intercal B^\intercal$ και το γεγονός ότι ο A^{-1} είναι θετικά ορισμένος. Άρα, ο S είναι θετικά ορισμένος. □

Άσκηση 6

Έστω $A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, θετικά ορισμένος. Να αποδείξετε ότι $a_{ii} > 0$, για $i = 1, 2, \dots, n$.

Λύση. Αφού ο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι θετικά ορισμένος, εφαρμόζουμε τον ορισμό επιλέγοντας για διανύσματα x τις στήλες e_iτου ταυτοτικού πίνακα. Εάν $x = e_i \Rightarrow\ e_i^T Ae_i = a_{ii} > 0$.

Επομένως τα διαγώνια στοιχεία ενός θετικά ορισμένου πίνακα είναι θετικά. □

Άσκηση 7 Ορίζουσα block πίνακα

Να βρεθεί η ορίζουσα του block πίνακα

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

όπου $A_{11} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ αντιστρέψιμος και $A_{22} \in \mathbb{R}^{m\times m}$.

Λύση.
Ο πίνακας A μπορεί να παραγοντοποιηθεί ως εξής:

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ A_{21} \cdot {A_{11}}^{-1} & I_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} - A_{21}{A_{11}}^{-1}A_{12} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_n & {A_{11}}^{-1}A_{12} \\ 0 & I_m \end{bmatrix},$$

$$detA = \det \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ A_{21} \cdot {A_{11}}^{-1} & I_m \end{bmatrix} \det \begin{bmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} - A_{21}{A_{11}}^{-1}A_{12} \end{bmatrix} \det \begin{bmatrix} I_n & {A_{11}}^{-1}A_{12} \\ 0 & I_m \end{bmatrix}.$$

Εάν ο πίνακας είναι block άνω ή κάτω τριγωνικός ισχύει

$$\begin{aligned} M = \begin{bmatrix} B & C \\ 0 & D \end{bmatrix} &\Rightarrow detM = detB \cdot detD \Rightarrow detA = \\ &= \det I_n \cdot \det I_m \cdot \det A_{11} \cdot \det(A_{22} - A_{21}{A_{11}}^{-1}A_{12}) \cdot \det I_n \cdot \det I_m \\ &= \det(A_{11}) \det(A_{22} - A_{21}{A_{11}}^{-1}A_{12}). \end{aligned}$$

Σημείωση: Συνοψίζοντας, η ορίζουσα ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{(n+m)\times(n+m)}$ ισούται με
$\det(A) = \det(A_{22}) \det(A_{11} - A_{12}{A_{22}}^{-1}A_{21})$, A_{22} αντιστρέψιμος.
$\det(A) = \det(A_{11}) det(A_{22} - A_{21}{A_{11}}^{-1}A_{12})$, A_{11} αντιστρέψιμος. □

Άσκηση 8

Έστω $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ συμμετρικός, θετικά ορισμένος πίνακας. Να αποδείξετε ότι

$$\det(A) \leq a_{11}a_{22}\dots a_{nn}.$$

Λύση. Θα χρησιμοποιήσουμε επαγωγή ως προς n. Εάν ο πίνακας A είναι 1×1, το αποτέλεσμα ισχύει. Ας υποθέσουμε ότι ισχύει για κάθε $(n-1) \times (n-1)$ θετικά ορισμένο πίνακα A. Δηλαδή, υποθέτουμε ότι $det(A) \leq a_{11}a_{22}\dots a_{n-1,n-1}$.
Έστω A^* $n \times n$ θετικά ορισμένος πίνακας. Τότε ο πίνακας A^* μπορεί να γραφεί στη μορφή:

$$A^* = \begin{pmatrix} A_{n-1} & c \\ c^T & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad c \in \mathbb{R}^{n-1} \Rightarrow$$

$$\det(A^*) = \det(A_{n-1}) \det(a_{nn} - c^T A_{n-1}^{-1} c) = \det(A_{n-1})(a_{nn} - c^T A_{n-1}^{-1} c) \leq \det(A_{n-1}) a_{nn},$$

αφού ο πίνακας A_{n-1}^{-1} είναι θετικά ορισμένος και κατά συνέπεια $c^T {A_{n-1}}^{-1} c \geqslant 0$. Όμως από την υπόθεση, $\det(A) \leqslant a_{11}a_{22}\dots a_{n-1,n-1}$ και από την επαγωγή προκύπτει το αποτέλεσμα. $\square$

Άσκηση 9 Ανισότητα Hadamard

Έστω $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Να αποδείξετε ότι

$$det(A) \leq \prod_{i=1}^{n} (\sum_{j=1}^{n} a_{ji}^2)^{\sqrt{1/2}}.$$

Λύση. Εάν ο A είναι ιδιάζων ισχύει. Ας υποθέσουμε ότι $det(A) \neq 0$. Θέτουμε $B = A^T A$. Από την κατασκευή του, ο πίνακας B είναι θετικά ορισμένος και για την ορίζουσά του ισχύει $\det(B) = \det(A^\top A) = \det(A^T)\det(A) = \det(A)^2$. Από την Άσκηση 8, έχουμε, $\det(B) \leqslant \prod_{i=1}^n b_{ii}$. Όμως, $b_{ii} = \sum_{j=1}^n a_{ji}^2$, οπότε θα έχουμε

$$\det(B) \leq \prod_{i=1}^{n} (\sum_{j=1}^{n} a_{ji}^2).$$

Αφού όμως $\det(A) = \sqrt{\det(B)}$, προκύπτει το αποτέλεσμα.
Σημείωση: Οι πίνακες για τους οποίους η παραπάνω ανισότητα ισχύει ως ισότητα, είναι οι πίνακες Hadamard. $\square$

Άσκηση 10

Έστω ο συμμετρικός θετικά ορισμένος πίνακας

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & \vdots & A_{12} \\ \cdots & & \cdots \\ A_{21} & \vdots & A_{22} \end{bmatrix}.$$

Να αποδείξετε ότι οι διαγώνιοι πίνακες A_{11} και A_{22} είναι επίσης θετικά ορισμένοι και κατά συνέπεια όλες οι κύριες υποορίζουσες του πίνακα A είναι θετικές.

Λύση. Θα δείξουμε ότι ο $j \times j$ πίνακας A_{11} είναι επίσης θετικά ορισμένος, ενώ ομοίως αποδεικνύεται ότι και ο A_{22} είναι θετικά ορισμένος.
Επειδή ο A είναι συμμετρικός, προφανώς οι πίνακες A_{11}, A_{22} είναι συμμετρικοί. Θα δείξουμε ότι $y^t A_{11} y > 0$, για κάθε $y \in R^j$, $y \neq 0$.

Έστω $y \in R^j$, $y \neq 0$. Αν θέσουμε $x = \begin{bmatrix} y \\ \cdots \\ 0 \end{bmatrix} \in R^n$, τότε $x \neq 0$ και επειδή ο A είναι θετικά ορισμένος θα ισχύει

$$x^T A x > 0 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} y & \vdots & 0^t \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y \\ \cdots \\ 0 \end{bmatrix} > 0 \Leftrightarrow yTtA_{11}y > 0.$$

Επομένως, ο πίνακας A_{11} είναι θετικά ορισμένος.
Κατά συνέπεια, όλες οι κύριες υποορίζουσες ενός θετικά ορισμένου πίνακα είναι θετικές. □

Άσκηση 11
Να δοθεί αλγόριθμος που υπολογίζει την παραγοντοποίηση LU ενός τριδιαγώνιου πίνακα A με τη μέθοδο απαλοιφής Gauss.

Λύση. Έστω

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \ldots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \ldots & 0 \\ 0 & a_{32} & \ldots & & \ldots \\ \ldots & \ldots & & a_{(n-1)(n-1)} & a_{(n-1)n} \\ 0 & 0 & \ldots & a_{n(n-1)} & a_{nn} \end{bmatrix}.$$

Αφού ο πίνακας A είναι τριδιαγώνιος, για την άνω τριγωνοποίησή του αρκεί να υπολογίσουμε μόνο τα στοιχεία της κύριας διαγωνίου καθώς και αυτά που βρίσκονται πάνω και κάτω από αυτήν. Εφαρμόζουμε μερική οδήγηση και, εάν απαιτείται εναλλαγή, αυτή γίνεται μόνο για τα συγκεκριμένα στοιχεία αποφεύγοντας έτσι περιττές εναλλαγές μεταξύ μηδενικών εισόδων. Καταλήγουμε έτσι στον παρακάτω αλγόριθμο:

Αλγόριθμος Gausstridiag

for $k = 1, 2, \ldots, n-1$
  if $|a_{(k+1)k}| > |a_{kk}|$
    swap $(a_{(k+1)(k+1)}, a_{k(k+1)})$
    if $k+1 \leq n$
      swap $(a_{(k+1)(k+1)}, a_{k(k+1)})$
      if $k+2 \leq n$
        swap $(a_{(k+1)(k+2)}, a_{k(k+2)})$
  $m = \frac{a_{(k+1)k}}{a_{kk}}$
  for $j = k, k+1, k+2$
    $a_{(k+1)j} = a_{(k+1)j} - m a_{kj} \quad \longleftarrow 1flop$

Πολυπλοκότητα: Απαιτούνται μόνο $O(n)$ flops, αφού κάθε επανάληψη χρειάζεται περίπου 1 flop και εκτελείται το πολύ 3 φορές. Οι αντιμεταθέσεις δεν απαιτούν υπολογιστικές πράξεις.

Εφαρμογή: Εφαρμόζουμε τον παραπάνω αλγόριθμο στον πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}.$$

Έχουμε:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \rightsquigarrow \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{15}{4} & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \rightsquigarrow\rightsquigarrow \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{15}{4} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{56}{15} & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} \rightsquigarrow \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{15}{4} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{56}{15} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{209}{56} \end{bmatrix}.$$

Παρατήρηση: Στο Παράδειγμα 4.4.4. είδαμε την άμεση παραγοντοποίηση Doolitle του ίδιου πίνακα. Βλέπουμε λοιπόν ότι η μέθοδος απαλοιφής Gauss παράγει την ίδια ακριβώς παραγοντοποίηση και επιβεβαιώνουμε την ισοδυναμία των δύο μεθόδων.

□

Άσκηση 12

Να υπολογίσετε τον παράγοντα Cholesky του πίνακα

$$A = \begin{bmatrix} 16 & 4 & 8 & 4 \\ 4 & 10 & 8 & 4 \\ 8 & 8 & 12 & 10 \\ 4 & 4 & 10 & 12 \end{bmatrix}.$$

Λύση.

Έστω $H = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 \\ h_{21} & h_{22} & 0 \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix}$ ο παράγοντας Cholesky του A. Ισχύει η ακόλουθη σχέση:

$$HH^T = \begin{bmatrix} h_{11} & 0 & 0 \\ h_{21} & h_{22} & 0 \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{11} & h_{21} & h_{31} \\ 0 & h_{22} & h_{32} \\ 0 & 0 & h_{33} \end{bmatrix} =$$

$$\begin{bmatrix} {h_{11}}^2 & h_{11}h_{21} & h_{11}h_{31} \\ h_{21}h_{11} & {h_{21}}^2 + {h_{22}}^2 & h_{21}h_{31} + h_{22}h_{32} \\ h_{31}h_{11} & h_{31}h_{21} + h_{32}h_{22} & {h_{31}}^2 + {h_{32}}^2 + {h_{33}}^2 \end{bmatrix} = A.$$

Εξισώνοντας τα στοιχεία των πινάκων HH^T και A προκύπτει:

$$\begin{array}{rr} h_{11} = \sqrt{a_{11}} = 4 & h_{22} = \sqrt{a_{22} - \frac{{a_{21}}^2}{a_{11}}} = \sqrt{10-1} = 3 \\ h_{21} = \frac{a_{12}}{h_{11}} = 1 & h_{32} = \frac{a_{32} - h_{21}h_{31}}{h_{22}} = 2 \\ h_{31} = \frac{a_{31}}{h_{11}} = 2 & h_{33} = \sqrt{a_{33} - {h_{31}}^2 - {h_{32}}^2} = 2 \\ h_{41} = \frac{a_{41}}{h_{11}} = 1 & h_{42} = \frac{a_{42} - h_{41}h_{21}}{h_{22}} = 1 \\ h_{43} = \frac{a_{43} - h_{41}h_{31} - h_{42}h_{32}}{h_{33}} = 3 & h_{44} = \sqrt{a_{44} - {h_{41}}^2 - {h_{42}}^2 - {h_{43}}^2} = 1 \end{array}$$

Ο παράγοντας Cholesky του A είναι

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

□

Ασκήσεις προς επίλυση

1. Να δοθεί αλγόριθμος που να υπολογίζει απ'ευθείας την παραγοντοποίηση Crout ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Να εκτιμηθεί η υπολογιστική πολυπλοκότητα.

2. Να δοθεί αλγόριθμος που να υπολογίζει απ'ευθείας την παραγοντοποίηση Doolitle με μερική οδήγηση ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Να εκτιμηθεί η υπολογιστική πολυπλοκότητα.

3. Να δοθεί αλγόριθμος που να υπολογίζει απ'ευθείας την παραγοντοποίηση ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ σε γινόμενο της μορφής LDU_1, όπου L μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας, D διαγώνιος πίνακας και U_1 άνω τριγωνικός. Να εκτιμηθεί η υπολογιστική πολυπλοκότητα.

4. Να δοθεί αλγόριθμος που να υπολογίζει απ'ευθείας την παραγοντοποίηση ενός συμμετρικού πίνακα $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ σε γινόμενο της μορφής LDL^T, όπου L μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας και D διαγώνιος πίνακας. Να εκτιμηθεί η υπολογιστική πολυπλοκότητα.

5. Να δοθεί αλγόριθμος που να υπολογίζει απ'ευθείας και μέσω της απαλοιφής Gauss την παραγοντοποίηση LU ενός πίνακα $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\;m \geq n, rank(A) = n$. Να συγκριθούν οι δύο τρόποι υπολογισμού και να εκτιμηθεί η υπολογιστική πολυπλοκότητα.

6. Να υπολογίσετε τον παράγοντα Cholesky των πινάκων

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 9 & 5 \\ 1 & 5 & 14 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 4 & -2 & 4 & 2 \\ -2 & 10 & -2 & -7 \\ 4 & -2 & 8 & 4 \\ 2 & -7 & 4 & 7 \end{bmatrix}.$$