Factorización de Cholesky: deducción de las fórmulas del algoritmo

Objetivos. Deducir fórmulas para el algoritmo de factorización de Cholesky.

Requisitos. Multiplicación de matrices, matrices triangulares.

1. Problema. Dada una matriz invertible $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$, buscamos una matriz $L \in \mathfrak{lt}_n(\mathbb{R})$ tal que $LL^\top = A$. Luego vamos a demostrar que L existe si y sólo si A es simétrica y positiva definida. Para garantizar la unicidad de L se pide que las entradas diagonales de L sean positivas.

2. Ejercicio. Se recomienda considerar el caso $n = 4$, expresar las entradas de A a través de ciertas entradas de L y deducir fórmulas para calcular las entradas de L. Se recomienda el siguiente esquema:

- Considerar $A_{1,1}$ y expresar $L_{1,1}$.
- Considerar $A_{2,1}$ y expresar $L_{2,1}$; considerar $A_{2,2}$ y expresar $L_{2,2}$.
- $A_{3,1} \mapsto L_{3,1}$, $A_{3,2} \mapsto L_{3,2}$, $A_{3,3} \mapsto L_{3,3}$.
- $A_{4,1} \mapsto L_{4,1}$, $A_{4,2} \mapsto L_{4,2}$, $A_{4,3} \mapsto L_{4,3}$, $A_{4,4} \mapsto L_{4,4}$.

3. Fórmulas para calcular L. Primero relacionemos las entradas diagonales de A con ciertas entradas de L. Aplicamos la definición del producto, la definición de la matriz transpuesta y la definición de matrices triangulares inferiores:

$$\begin{aligned} A_{p,p} = (LL^\top)_{p,p} &= \sum_{k=1}^{n} L_{p,k}(L^\top)_{k,p} = \sum_{k=1}^{n} L_{p,k}^2 \\ &= \sum_{k=1}^{p-1} L_{p,k}^2 + L_{p,p}^2 + \sum_{k=p+1}^{n} \underbrace{L_{p,k}^2}_{0} = \sum_{k=1}^{p-1} L_{p,k}^2 + L_{p,p}^2. \end{aligned}$$

Despejamos $L_{p,p}$:

$$\boxed{L_{p,p} = \sqrt{A_{p,p} - \sum_{k=1}^{p-1} L_{p,k}^2}.}$$

Ahora relacionemos las entradas de la parte inferior de A con ciertas entradas de L. Sean $p \in \{1, \ldots, n\}$, $q \in \{1, \ldots, p-1\}$. Igual que antes, aplicamos la definición del producto, la definición de la matriz transpuesta y la definición de matrices triangulares inferiores:

$$\begin{aligned}
A_{p,q} &= (LL^\top)_{p,q} = \sum_{k=1}^{n} L_{p,k} (L^\top)_{k,q} = \sum_{k=1}^{n} L_{p,k} L_{q,k} \\
&= \sum_{k=1}^{q-1} L_{p,k} L_{q,k} + L_{p,q} L_{q,q} + \sum_{q+1}^{n} L_{p,k} \underbrace{L_{q,k}}_{0} = \sum_{k=1}^{q-1} L_{p,k} L_{q,k} + L_{p,q} L_{q,q}.
\end{aligned}$$

Despejamos $L_{p,q}$:

$$\boxed{L_{p,q} = \frac{A_{p,q} - \sum\limits_{k=1}^{q-1} L_{p,k} L_{q,k}}{L_{q,q}}.}$$

4. Algoritmo. Las entradas de L se pueden calcular en el siguiente orden: por renglones de arriba hacia abajo, y en cada renglón de izquierda a derecha:

```
Para p := 1,...,n:
   Para q := 1,...,p-1:
      L[p, q] := ...;
   L[p, p] := ...;
```

Otra manera es ir por columnas, de izquierda a derecha, y en cada columna de arriba hacia abajo:

```
Para q := 1,...,n:
   L[q, q] := ...;
   Para p := q,...,n:
      L[p, q] := ...;
```

En el cálculo de la entrada $L_{p,p}$ se utiliza el valor de $A_{p,p}$ y los valores previamente calculados $L_{p,k}$ con $k < p$. Esquema para $n = 4$, $p = 3$:

$$\begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & A_{1,3} & A_{1,4} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & A_{2,3} & A_{2,4} \\ A_{3,1} & A_{3,2} & A_{3,3} & A_{3,4} \\ A_{4,1} & A_{4,2} & A_{4,3} & A_{4,4} \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} L_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ L_{2,1} & L_{2,2} & 0 & 0 \\ L_{3,1} & L_{3,2} & L_{3,3} & 0 \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & L_{4,4} \end{bmatrix},$$

$$L_{3,3} = \sqrt{A_{3,3} - L_{3,1}^2 - L_{3,2}^2}.$$

En el cálculo de la entrada $L_{p,q}$ se utiliza el valor de $A_{p,q}$ y los valores previamente calculados $L_{q,q}$, $L_{q,k}$ con $k < q$ y $L_{p,k}$ con $k < q$. Esquema para $n = 4$, $p = 4$, $q = 3$:

$$\begin{bmatrix} A_{1,1} & A_{1,2} & A_{1,3} & A_{1,4} \\ A_{2,1} & A_{2,2} & A_{2,3} & A_{2,4} \\ A_{3,1} & A_{3,2} & A_{3,3} & A_{3,4} \\ A_{4,1} & A_{4,2} & A_{4,3} & A_{4,4} \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} L_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\ L_{2,1} & L_{2,2} & 0 & 0 \\ L_{3,1} & L_{3,2} & L_{3,3} & 0 \\ L_{4,1} & L_{4,2} & L_{4,3} & L_{4,4} \end{bmatrix},$$

$$L_{4,3} = \frac{A_{4,3} - L_{4,1}L_{3,1} - L_{4,2}L_{3,2}}{L_{3,3}}.$$

5. Ejemplo.

$$A = \begin{bmatrix} 25 & 15 & -5 & -10 \\ 15 & 10 & 1 & -7 \\ -5 & 1 & 21 & 4 \\ -10 & -7 & 4 & 18 \end{bmatrix}.$$

Calculamos L en el orden por columnas:

$$\begin{aligned}
L_{1,1} &= \sqrt{A_{1,1}} = \sqrt{25} = 5, \\
L_{2,1} &= \frac{A_{2,1}}{L_{1,1}} = \frac{15}{5} = 3, \\
L_{3,1} &= \frac{A_{3,1}}{L_{1,1}} = \frac{-5}{5} = -1, \\
L_{4,1} &= \frac{A_{4,1}}{L_{1,1}} = \frac{-10}{5} = -2,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{2,2} &= \sqrt{A_{2,2} - L_{2,1}^2} = \sqrt{10 - 9} = 1, \\
L_{3,2} &= \frac{A_{3,2} - L_{3,1}L_{2,1}}{L_{2,2}} = \frac{1 - (-3)}{1} = 4, \\
L_{4,2} &= \frac{A_{4,2} - L_{4,1}L_{2,1}}{L_{2,2}} = \frac{-7 - (-6)}{1} = -1,
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
L_{3,3} &= \sqrt{21 - 1 - 16} = 2, \\
L_{4,3} &= \frac{A_{4,3} - L_{4,1}L_{3,1} - L_{4,2}L_{3,2}}{L_{3,3}} = \frac{4 - 2 - (-4)}{2} = 3,
\end{aligned}$$

$$L_{4,4} = \sqrt{A_{4,4} - L_{4,1}^2 - L_{4,2}^2 - L_{4,3}^2} = \sqrt{18 - 4 - 1 - 9} = 2.$$

Respuesta:

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