Pokiaľ by sme chceli použiť čiastočné pivotovanie, porušíme symetriu. Ak by sme teda pri výmenách riadkov zachovať symetriu, musíme meniť aj príslušné stĺpce, čo však spôsobí, že na mieste pivota môže byť len prvok z diagonály. Prvky na diagonále však môžu byť všetky nulové aj pri regulárnej matici, ako ukazuje príklad

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

V prípade kladne definitných matíc však môžeme použiť nasledovný fakt

Veta. Ak symetrická matica A je kladne definitná, tak všetky jej hlavné podmatice získané pri GEM sú kladne definitné.

Dôkaz. Vezmime kladne definitnú symetrickú maticu

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a^T \\ a & B \end{pmatrix}.$$

Po prvom kroku GEM získame maticu

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a^T \\ 0 & B - \frac{1}{a_{11}} a a^T \end{pmatrix}.$$

Vezmime ľubovoľný nenulový vektor z tvaru $z = (x|y^T)^T$ kde $x \in \mathbb{R}$ a y je $n-1$-vektor. Potom z kladnej definitnosti matice A máme

$$0 < z^T A z = x^2 a_{11} + 2a^T y x + y^T B y$$

Po úprave GEM pre príslušnú podmaticu máme

$$y^T \left(B - \frac{a a^T}{a_{11}} \right) y = y^T B y - \frac{(a^T y)^2}{a_{11}}$$

Potom môžeme odhadnúť

$$y^T B y - \frac{(a^T y)^2}{a_{11}} > -\frac{(a^T y)^2}{a_{11}} - x^2 a_{11} - 2a^T y x = -\frac{1}{a_{11}} \left(a_{11} x + a^T y \right)^2$$

Táto nerovnosť platí pre ľubovoľné x, teda aj pre $x = -\frac{a^T y}{a_{11}}$, pre ktoré je výraz n zátvorke rovný 0. T.j. $B - \frac{a a^T}{a_{11}}$ je kladne definitná. Ďalej indukcia.

Vďaka tejto vete vieme, že v diagonálnej matici D sú všetky prvky na diagonále kladné. Môžeme preto D odmocniť, $D = \sqrt{D}\sqrt{D}$ a prepísať

$$A = LDL^T = L\sqrt{D}\sqrt{D}L^T = \bar{L}\bar{L}^T$$

Tým dostávame nový typ rozkladu pre symetrické kladne definitné matice, ktorý voláme Choleského rozklad symetrickej kladne definitnej matice A.

$$A = \bar{L}\bar{L}^T \tag{1}$$

pričom $\bar{L}$ je dolná trojuholníková matica s kladnými prvkami na diagonále.

Aj keď Choleského rozklad dokážeme získať pomocou LDL rozkladu matice A, efektívnejšie je počítať ho porovnaním stĺpcov matíc v rovnosti (1). Pre $n \times n$ maticu A a $1 \leq j \leq n$ máme

$$\begin{aligned} A(:,j) &= \sum_{k=1}^{n} \bar{L}(:,k)\bar{L}^T(k,j) = \sum_{k=1}^{n} \bar{L}(:,k)\bar{L}(j,k) \\ &= \sum_{k=1}^{j} \bar{L}(j,k)\bar{L}(:,k) = \bar{L}(j,j)\bar{L}(:,j) + \sum_{k=1}^{j-1} \bar{L}(j,k)\bar{L}(:,k) \end{aligned}$$

z čoho dostávame

$$\bar{L}(j,j)\bar{L}(:,j) = A(:,j) - \sum_{k=1}^{j-1} \bar{L}(j,k)\bar{L}(:,k)$$

označme pravú stranu ako vektor v

$$A(:,j) - \sum_{k=1}^{j-1} \bar{L}(j,k)\bar{L}(:,k) = v$$

Potom

$$\bar{L}(j,j)\bar{L}(j,j) = v(j) \Rightarrow \bar{L}(j,j) = \sqrt{v(j)}$$

a

$$\bar{L}(j:n,j) = \frac{1}{\sqrt{v(j)}} \left[A(j:n,j) - \sum_{k=1}^{j-1} \bar{L}(j,k)\bar{L}(j:n,k) \right] = \frac{v(j:n)}{v(j)}$$

Opäť je možné ušetriť miesto prepisovaním dolnej trojuholníkovej časti matice A. **Príklad**: Nájdite Choleského rozklad matice

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 & -2 \\ -2 & 2 & -5 & -1 \\ 4 & -5 & 22 & 8 \\ 2 & -1 & 8 & 9 \end{pmatrix}$$

Riešenie: Začneme výpočtom $L(1,1)$, čo je zrejme $\sqrt{A(1,1)} = 2$ a prvý stĺpec matice $\bar{L}$ bude $\frac{1}{2}A(1:n,1)$. Prepísaním prvého stĺpca matice A dostaneme

$$\begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -2 \\ -1 & 2 & -5 & -1 \\ 2 & -5 & 22 & 8 \\ 1 & -1 & 8 & 9 \end{pmatrix}$$

Ďalej pokračujeme výpočtom druhého stĺpca.

$$L(2,2) = \sqrt{A(2,2) - L(2,1)^2} = \sqrt{2 - (-1)^2} = 1$$

a

$$L(2:4,2) = A(2:4,2) - L(2,1)L(2:n,1) = \begin{pmatrix} 2 \\ -5 \\ -1 \end{pmatrix} - (-1)\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ -3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Dostávame tak

$$\begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -2 \\ -1 & 1 & -5 & -1 \\ 2 & 3 & 22 & 8 \\ 1 & 0 & 8 & 9 \end{pmatrix}$$

Pre tretí stĺpec máme

$$L(3,3) = \sqrt{A(3,3) - L(3,1)^2 - L(3,2)^2} = \sqrt{22 - 4 - 9} = 3$$

a

$$L(3:4,3) = \frac{1}{3}\left[\begin{pmatrix} 22 \\ 8 \end{pmatrix} - 2\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix} - 3\begin{pmatrix} 3 \\ 0 \end{pmatrix}\right] = \begin{pmatrix} 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

čiže

$$\begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -2 \\ -1 & 1 & -5 & -1 \\ 2 & 3 & 3 & 8 \\ 1 & 0 & 2 & 9 \end{pmatrix}$$

Nakoniec už len stačí spočítať

$$L(4,4) = \sqrt{A(4,4) - L(4,1)^2 - L(4,2)^2 - L(4,3)^2} = \sqrt{9 - 4 - 1} = 2$$

a máme výsledok

$$\begin{pmatrix} 2 & -2 & 4 & -2 \\ -1 & 1 & -5 & -1 \\ 2 & 3 & 3 & 8 \\ 1 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}$$

teda rozklad

$$A = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 4 & -2 \\ -2 & 2 & -5 & -1 \\ 4 & -5 & 22 & 8 \\ 2 & -1 & 8 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

V prípade presnej aritmetiky vieme, že kladne definitná štvorcová matica má Choleského rozklad. Navyše platí aj opačné tvrdenie v nasledujúcej forme. Ak vo vyššie uvedenom algoritme sú všetky odmocniny kladné reálne čísla, tak daná matica je kladne definitná. Choleského rozklad je preto možné v pricípe použiť aj na zistenie, či daná matica je kladne definitná. Z hľadiska numerickej stability je zaujímavá nerovnosť

$$a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik}^2 \geq l_{ik}^2$$

Takže prvky matice $\bar{L}$ sú pekne ohraničené.

LTL^T rozklad

V prípade symetrických indefinitných matíc sme videli, že LDL^T rozklad existovať nemusí. A aj v prípade, že existuje, zlepšenie stability pivotovaním bez straty symetrie môžeme len výberom pivota z diagonály. Jedna z možností, ako umožniť pivotovanie aj inými prvkami ako diagonálnymi je LTL^T rozklad matice

$$PAP^T = LTL^T$$

kde P je permutačná matica, L je dolná trojuholníková s jednotkami na diagonále a T je trojdiagonálna matica (matica v ktorej sa nenulové prvky môžu nachádzať len na diagonále a nad a pod diagonálou).

Pri použití LTL^T rozkladu na riešenie systému rovníc $Ax = b$ sa postupuje nasledovne

$$Lz = Pb,\ Tw = z,\ L^T y = w,\ x = P^T y.$$

Uvedieme dva algoritmy na výpočet tohoto rozkladu. Prvý je založený na klasickej GEM s pivotovaním.

Parlettov-Riedov algoritmus

Nech A je matica $n \times n$. Pomocou Gaussových operácií budeme postupne vytvárať trojdiagonálnu maticu. V prvom kroku vezmeme časť $A(2:n,1)$ prvého stĺpca matice A a nájdeme permutačnú maticu $\tilde{P}$ takú že vektor $\tilde{v} = \tilde{P}A(2:n,2)$ bude mať na prvom mieste v absolútnej hodnote najväčší prvok z prvkov vektora $A(2:n,1)$

$$|v(1)| = \max_{2 \le i \le n} \{|A(i,1)|\}.$$

Potom zostrojíme permutačnú maticu $P_1 = \operatorname{diag}\{1, \tilde{P}\}$ a maticu $M_1 = I - m_1 e_2^T$, kde m_1 je vektor multiplikátorov $m_1 = (0\ v(2)/v(1)\ v(3)/v(1)\ \cdots)$. Potom vytvoríme klasicky maticu

$$A^{(1)} = M_1 P_1 A P_1^T M_1^T = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots \\ \beta_1 & \alpha_2 & v_3 & \cdots \\ 0 & u_3 & \cdots & \cdots \\ 0 & u_4 & \cdots & \cdots \\ \vdots & \vdots & & \end{pmatrix}$$

Tento postup opakujeme pre podmaticu $A(2:n,2:n)$. Po $n-2$ krokoch dostaneme

$$T = A^{(n-2)} = M_{n-2}P_{n-2}\cdots M_1 P_1 A P_1^T M_1^T \cdots P_{n-2}^T M_{n-2}^T$$

z čoho ľahko odvodíme hľadaný rozklad

$$PAP^T = LTL^T$$

kde $P = P_{n-2}\cdots P_1$ a $L = (M_{n-2}P_{n-2}\cdots M_1 P_1 P^T)^{-1}$. Môžeme si všimnúť, že matica L má prvý stĺpec e_1.

Aasenova metóda

Budeme hľadať rozklad (zatiaľ bez pivotovania)

$$A = LTL^T$$

kde L je dolná trojuholníková a $L(:,1) = e_1$ a

$$\begin{pmatrix} \beta_1 & \alpha_1 & \cdots & \cdots & 0 \\ \alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & \beta_{n-1} \\ 0 & & & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{pmatrix}$$

Položme $H = TL^T$. To je tzv. horná Hessenbergova matica (matica, ktorá môže mať nenulové prvky najviac jeden krok pod diagonálou). Potom $A = LH$ a

$$A(:,j) = LH(:,j) = \sum_{k=1}^{j+1} L(:,k)H(k,j) = \sum_{k=1}^{j+1} L(:,k)h(k)$$

pričom sme označili vektor $h(1:j+1) = H(1:j+1,j)$ a $j \leq n-1$. Potom

$$\begin{aligned} A(j+1:n,j) &= \sum_{k=1}^{j+1} L(j+1:n,k)h(k) \\ &= L(j+1:n,j+1)h(j+1) + \sum_{k=1}^{j} L(j+1:n,k)h(k) \\ &= L(j+1:n,j+1)h(j+1) + L(j+1:n,1:j)h(1:j) \end{aligned}$$

teda

$$h(j+1)L(j+1:n,j+1) = A(j+1:n,j) - L(j+1:n,1:j)h(1:j)$$

Táto rovnica umožňuje spočítať $j+1$-vý stĺpec matice L ak poznáme všetky predchádzajúce stĺpce matice L a j-ty stĺpec matice H. Ak označíme

$$v(j+1:n) = A(j+1:n,j) - L(j+1:n,1:j)h(1:j)$$

dostaneme $v(j+1) = h(h+1)$, lebo $L(j+1,j+1) = 1$. Z toho potom dostávame

$$L(j+2:n,j+1) = \frac{v(j+2:n)}{v(j+1)}$$

V tomto kroku je z hľadiska stability vhodné, aby $v(j+1)$ bolo čo najväčšie, čo vieme dosiahnuť vhodnou permutáciou. Z predpisu pre v vidíme, že túto permutáciu je potrebné aplikovať na A aj na L.

Pozrime sa teraz, ako v j-tom kroku získať prvky $h(1 : j+1)$. Na to využijeme vzťah $H = TL^T$.

$$\begin{pmatrix} h(1) \\ h(2) \\ \vdots \\ h(j+1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & & & \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & & & \\ & & & & & & \\ & & & & \beta_{j-2} & \alpha_{j-1} & \beta_{j-1} \\ & & & & & \beta_{j-1} & \alpha_j \\ & & & & & & \beta_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ l_{j2} \\ \vdots \\ l_{j\,j-1} \\ 1 \end{pmatrix}$$

Na začiatku kroku j poznáme $\alpha(1 : j-1)$, $\beta(1 : j-1)$ a $L(:, 1 : j)$. Poznáme teda prvých $j-2$ riadkov (časti) matice T. Z toho dostávame vzťahy pre $h(k)$, $1 \leq k \leq j-1$

$$\begin{aligned} h(1) &= \beta_1 l_{j2} \\ h(k) &= \beta_{k-1} l_{j\,k-1} + \alpha_k l_{j\,k} + \beta_k l_{j\,k+1}, \qquad 2 \leq k \leq j-1 \end{aligned}$$

Hodnotu $h(j)$ získame z $A = LH$

$$h(j) = A(j,j) - \sum_{k=1}^{j-1} L(j,k) h(k)$$

následne vieme spočítať

$$\begin{aligned} \alpha_j &= h(j) - \beta_{j-1} l_{j\,j-1} \\ \beta_j &= h(j+1) = v(j+1). \end{aligned}$$