Factorisation de Cholesky

La **factorisation de Cholesky**, nommée d'après André-Louis Cholesky, consiste, pour une matrice symétrique définie positive A, à déterminer une matrice triangulaire inférieure L telle que : $A=LL^T$.

La matrice L est en quelque sorte une « racine carrée » de A. Cette décomposition permet notamment de calculer la matrice inverse A^{-1}, de calculer le déterminant de A (égal au carré du produit des éléments diagonaux de L) ou encore de simuler une loi multinormale. Elle est aussi utilisée en chimie quantique pour accélérer les calculs (voir Décomposition de Cholesky (chimie quantique)).

Exemple

La matrice symétrique A :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 5 & 5 & 5 \\ 1 & 5 & 14 & 14 \\ 1 & 5 & 14 & 15 \end{pmatrix}$$

est égale au produit de la matrice triangulaire L :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 0 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$$

avec à sa droite sa transposée L^T :

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Théorème

Factorisation de Cholesky d'une matrice :

Si A est une matrice symétrique définie positive, il existe une matrice réelle triangulaire inférieure L telle que :

$A=LL^T$

On peut également imposer que les éléments diagonaux de la matrice L soient tous positifs, et la factorisation correspondante est alors unique.

Algorithme

On cherche la matrice :

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & & & \\ l_{21} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

De l'égalité $A=LL^T$ on déduit :

$$a_{ij} = \left(LL^T\right)_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} l_{jk} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik} l_{jk}, \ 1 \le i, j \le n$$

puisque l_{pq}=0 si 1≤p<q≤n.

La matrice A étant symétrique, il suffit que les relations ci-dessus soient vérifiées pour i≤j, c'est-à-dire que les éléments l_{ij} de la matrice L doivent satisfaire :

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} l_{jk},\ 1 \le i \le j \le n$$

Pour i=1, on détermine la première colonne de L :

$$a_{11} = l_{11} l_{11} \text{ d'où } l_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

$$a_{1j} = l_{11} l_{j1} \text{ d'où } l_{j1} = \frac{a_{1j}}{l_{11}},\quad 2 \le j \le n$$

On détermine la $i^{\text{ème}}$ colonne de L $(2 \le i \le n)$, après avoir calculé les (i-1) premières colonnes :

$$a_{ii} = l_{i1} l_{i1} + \ldots + l_{ii} l_{ii} \text{ d'où } l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}$$

$$a_{ij} = l_{i1} l_{j1} + \ldots + l_{ii} l_{ji} \text{ d'où } l_{ji} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{ii}},\quad i+1 \le j \le n$$

Il résulte du théorème précédent qu'il est possible de choisir tous les éléments l_{ii}>0 en assurant que toutes les quantités

$$a_{11}, \ldots, a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2, \ldots$$

sont positives.

Décomposition de Cholesky alternative

La décomposition de Cholesky alternative permet d'éviter l'utilisation des racines carrées *au sein des sommes*, source potentielle de problème en calcul numérique, elle se calcule de la façon suivante[1] :

$$\mathbf{A} = \mathbf{LDL}^{\mathrm{T}}$$

où D est une matrice diagonale, et L une matrice triangulaire inférieure avec des 1 sur sa diagonale.

$$D_{jj} = A_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{jk}^2 D_{kk}$$

$$L_{ij} = \frac{1}{D_{jj}} \left(A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} L_{jk} D_{kk} \right), \qquad \text{pour } i > j.$$

Les factorisations $\mathbf{LDL}^{\mathrm{T}}$ et $\mathbf{LL}^{\mathrm{T}}$ (notez que la matrice **L** est différente dans les deux cas) sont liées:

$$\mathbf{A} = \mathbf{LDL}^{\mathrm{T}} = \mathbf{LD}^{\frac{1}{2}}\mathbf{D}^{\frac{1}{2}}\mathbf{L}^{\mathrm{T}} = \mathbf{LD}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{D}^{\frac{1}{2}})^{\mathrm{T}}\mathbf{L}^{\mathrm{T}} = \mathbf{LD}^{\frac{1}{2}}(\mathbf{LD}^{\frac{1}{2}})^{\mathrm{T}}$$

La dernière expression étant le produit d'une matrice triangulaire et de sa transposée, de la même manière que dans la factorisation $\mathbf{LL}^{\mathrm{T}}$.

Notez que la racine carré d'une matrice diagonale (ici, $\mathbf{D}^{½}$) se calcule trivialement en prenant les racines carrées de chacun de ses éléments.

Note

[1] **(en)** D. Watkins, *Fundamentals of Matrix Computations*, p. 84

Sources et contributeurs de l’article

Factorisation de Cholesky *Source*: http://fr.wikipedia.org/w/index.php?oldid=76199168 *Contributeurs*: Anarkman, Anne Bauval, Antoinehuberland, Archibald, Arrakis, Bluepoint, Calame, Cantons-de-l'Est, Cokaban, Dake, Dfeldmann, Gemme, Gilles85, Kilom691, Lebron54, Med, Nochnix, Nojhan, Ollamh, Peps, Pierrelm, Sam Hocevar, Silverkey, Stefp, Verbex, Vincent Semeria, 42 modifications anonymes

Licence