

CIMAT

Factorización Cholesky simbólica

Miguel Vargas-Félix

miguelvargas@ciamat.mx
<http://www.cimat.mx/~miguelvargas>

Factorización Cholesky para matrices completas

Un sistema de ecuaciones

$$\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

con una matriz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simétrica positiva definida, puede ser resuelto aplicando a esta matriz la factorización Cholesky

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T,$$

donde \mathbf{L} es una matriz triangular inferior. Esta factorización existe y es única [Quar00 p80].

Las fórmulas para determinar los valores de \mathbf{L} son

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

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

Para matrices completas, la complejidad computacional de este algoritmo es de orden $O(n^3)$.

Sustituyendo $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ tenemos por la factorización $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$, tenemos

$$\mathbf{L} \mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

hagamos

$$\mathbf{z} = \mathbf{L}^T \mathbf{x}$$

y entonces tendremos dos sistemas de ecuaciones triangulares

$$\mathbf{L} \mathbf{z} = \mathbf{b},$$

$$\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{z}.$$

Con $\mathbf{L} \mathbf{z} = \mathbf{b}$ se resuelve para \mathbf{z} haciendo una sustitución hacia adelante con

$$z_i = \frac{1}{L_{ii}} \left(y_i - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik} z_k \right)$$

y con $\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{z}$ resolvemos para \mathbf{x} sustituyendo hacia atrás con

$$x_i = \frac{1}{L_{ii}^T} \left(z_i - \sum_{k=i+1}^n L_{ik}^T x_k \right).$$

Factorización Cholesky para matrices ralas

Describiremos tres estrategias para disminuir el tiempo y uso de memoria en la factorizaciones Cholesky:

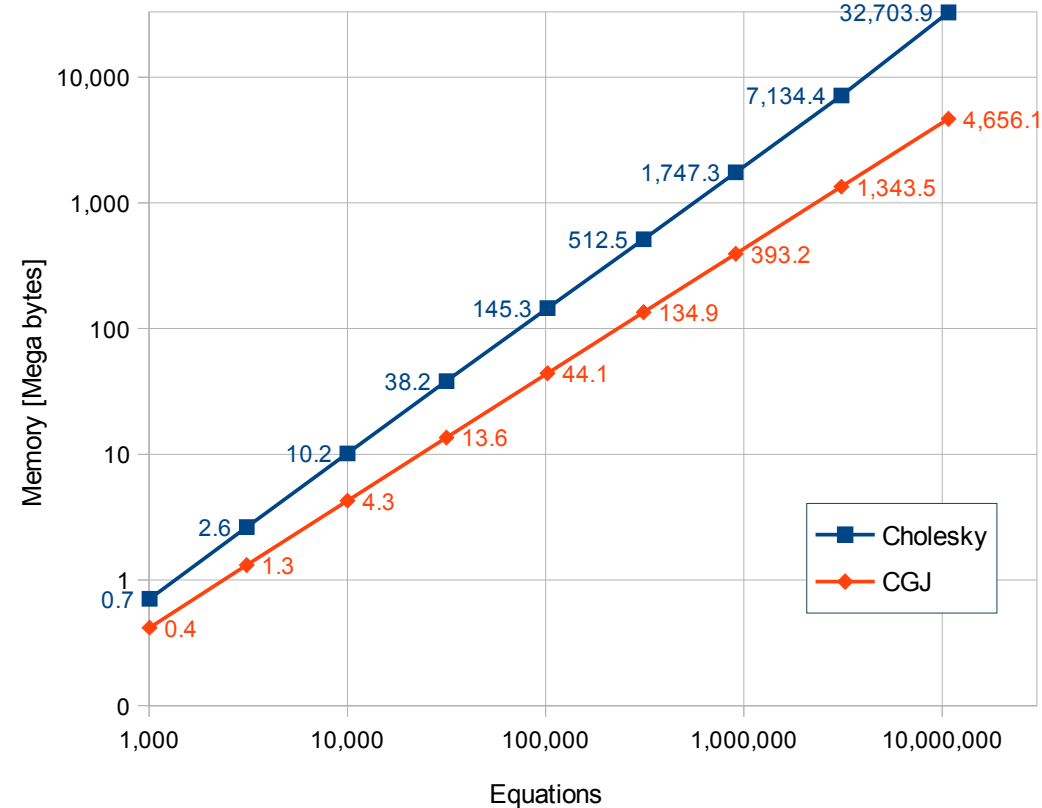
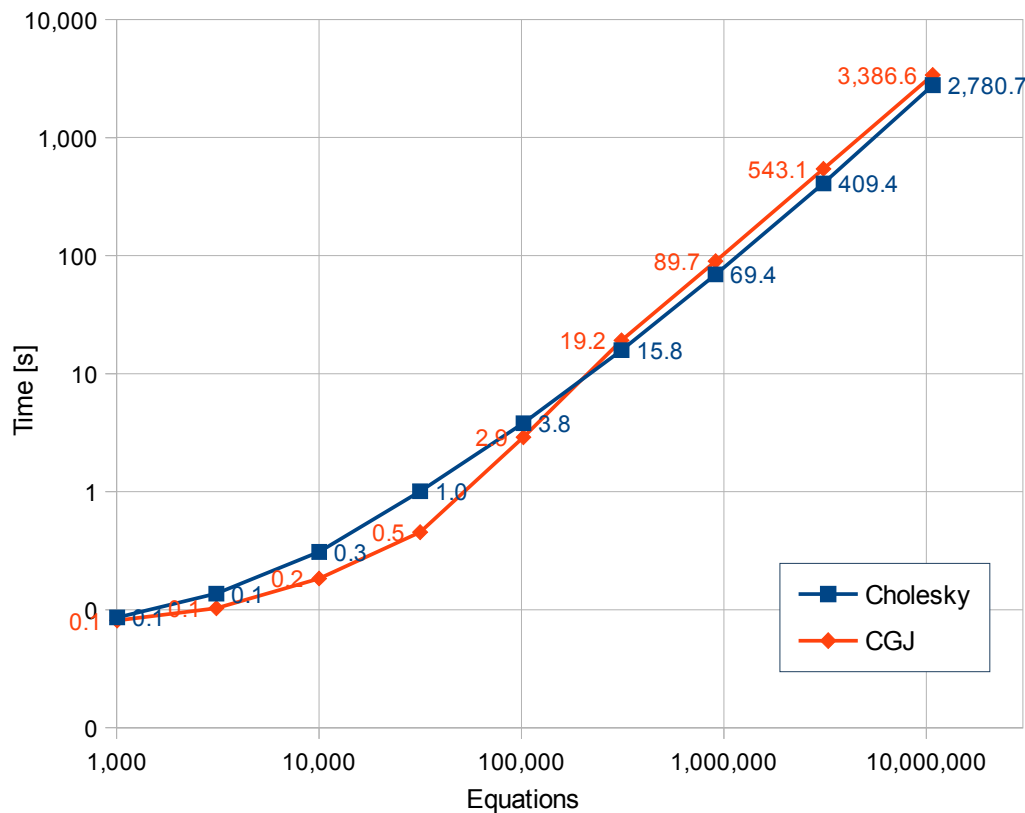
- Reordenar los renglones y columnas de la matriz del sistema de ecuaciones para reducir el tamaño de las matrices resultantes de la factorización. (Próxima clase)
- Utilizar la factorización Cholesky simbólica para obtener la factorización exacta y formar con ésta matrices ralas sin elementos cero.
- Seleccionando la secuencia de llenado de la factorización es posible paralelizar [Heat91].

Para matrices ralas, resultantes de problemas de elemento finito, se puede reducir la complejidad del algoritmo a casi $O(\eta(\mathbf{A}))$, tanto en tiempo de ejecución como en memoria utilizada.

Las estrategias anteriores son aplicables también a la factorización LU aplicada a matrices no simétricas en cuanto a sus valores, pero simétricas con respecto a su estructura.

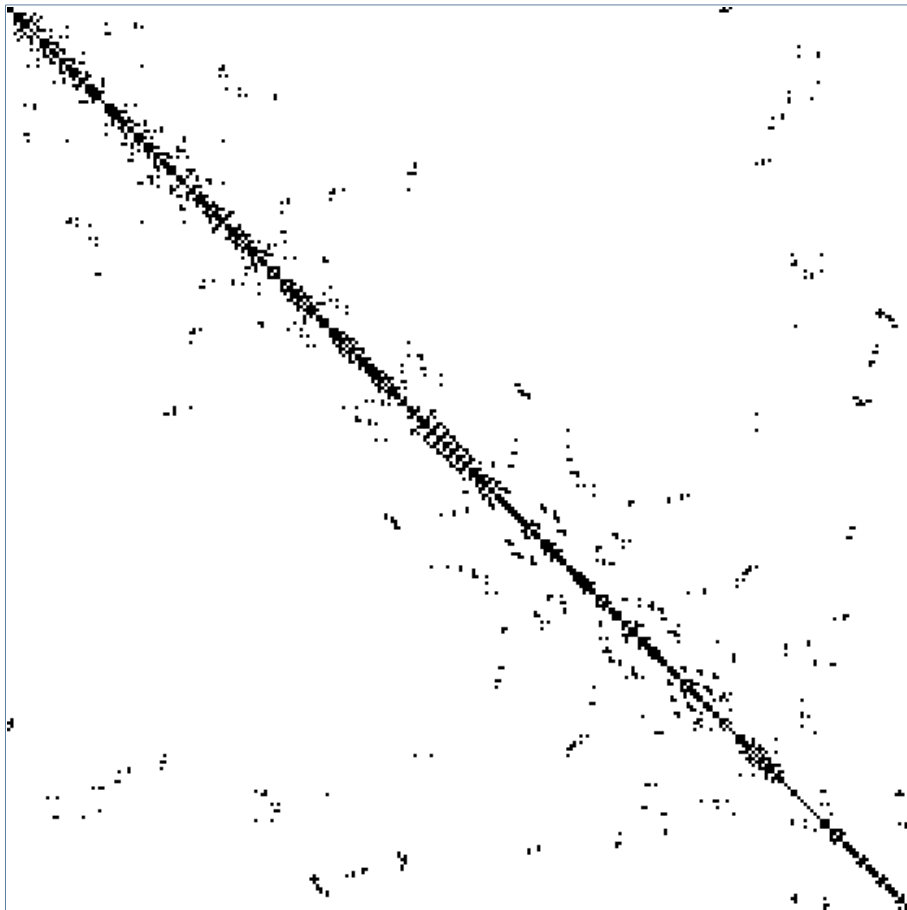
La siguiente traba muestra resultados comparando la solución de la ecuación de Poisson en 2D, comparando la factorización Cholesky con el gradiente conjugado con preconditionador Jacobi.

Number of equations	nnz(A)	nnz(L)	Cholesky Time [s]	CGJ Time [s]
1,006	6,140	14,722	0.086	0.081
3,110	20,112	62,363	0.137	0.103
10,014	67,052	265,566	0.309	0.184
31,615	215,807	1'059,714	1.008	0.454
102,233	705,689	4'162,084	3.810	2.891
312,248	2'168,286	14'697,188	15.819	19.165
909,540	6'336,942	48'748,327	69.353	89.660
3'105,275	21'681,667	188'982,798	409.365	543.110
10'757,887	75'202,303	743'643,820	2,780.734	3,386.609

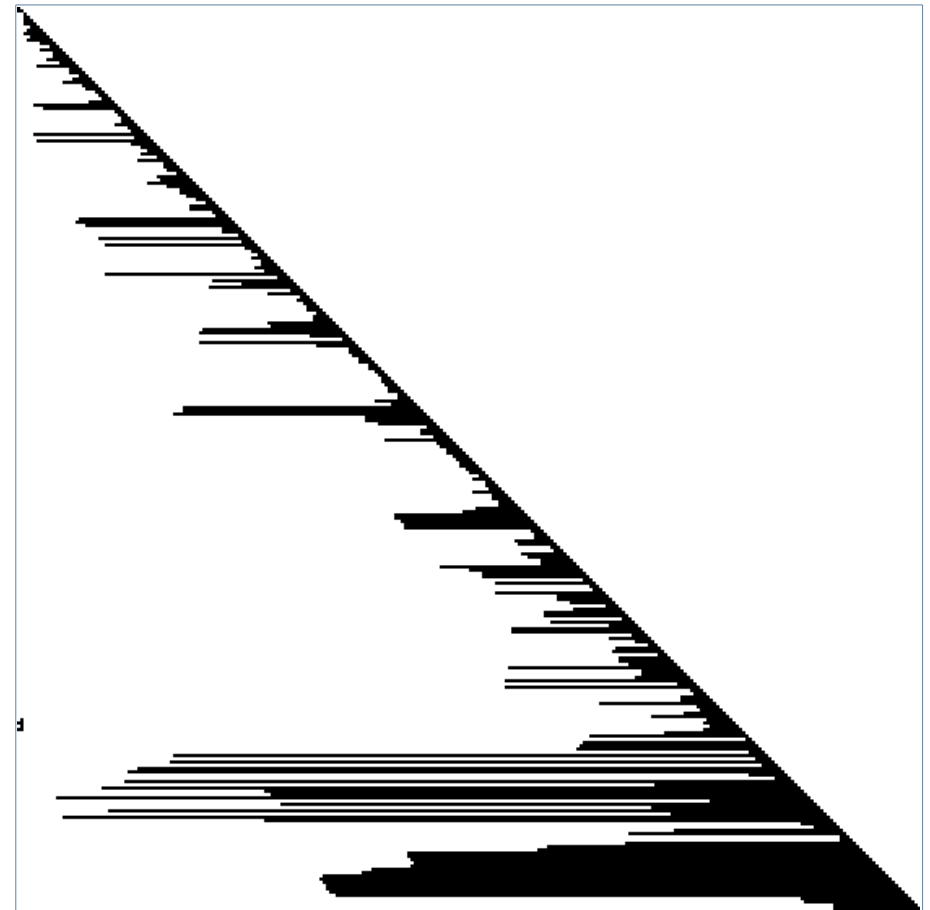


Factorización Cholesky simbólica

Recordemos la notación $\eta(\mathbf{L})$, que indica el número de elementos no cero de \mathbf{L} .



A



L

En este ejemplo la matriz \mathbf{A} es de tamaño 556×556 , con $\eta(\mathbf{A})=1810$, la matriz \mathbf{L} , con $\eta(\mathbf{L})=8729$, es el resultado de la factorización Cholesky de \mathbf{A} .

Cuando trabajamos con matrices grandes y dispersas, se desperdicia mucho tiempo si se calcula \mathbf{L} utilizando

$$L_{ij} = \frac{1}{L_{jj}} \left(A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} L_{jk} \right) \text{ y}$$

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

dado que hay muchas entradas L_{ij} que son cero.

La solución a este problema es determinar *a priori* que entradas L_{ij} de \mathbf{L} son distintas de cero y entonces sólo llenar éstas utilizando una versión de las ecuaciones anteriores para matrices dispersas.

El algoritmo para determinar los elementos distintos cero en \mathbf{L} se le denomina **factorización Cholesky simbólica** [Gall90 p86-88].

El algoritmo

Para una matriz rala \mathbf{A} , definamos

$$\mathbf{a}_i \stackrel{\text{def}}{=} \{k > i \mid A_{ik} \neq 0\}, i = 1 \dots n,$$

como el conjunto de los índices de los elementos no nulos del renglón i de la parte estrictamente triangular superior de \mathbf{A} .

De forma análoga definimos para la matriz triangular superior \mathbf{L}^T , los conjuntos

$$\mathbf{l}_i \stackrel{\text{def}}{=} \{k > i \mid L_{ik} \neq 0\}, i = 1 \dots n.$$

Para la matriz ejemplo siguiente, el conjunto \mathbf{a}_2 contendrá $\{3, 4\}$; el conjunto \mathbf{l}_2 contendrá $\{3, 4, 6\}$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & & & & A_{16} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & A_{24} & & \\ & A_{32} & A_{33} & & A_{35} & \\ & A_{42} & & A_{44} & & \\ & & A_{53} & & A_{55} & A_{56} \\ A_{61} & & & & A_{65} & A_{66} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{a}_2 = \{3, 4\}$$

$$\mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} L_{11} & L_{12} & & & & L_{16} \\ & L_{22} & L_{23} & L_{24} & & L_{26} \\ & & L_{33} & L_{34} & L_{35} & L_{36} \\ & & & L_{44} & L_{45} & L_{46} \\ & & & & L_{55} & L_{56} \\ & & & & & L_{66} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{l}_2 = \{3, 4, 6\}$$

Requeriremos de conjuntos r_i que serán usados para registrar los renglones de \mathbf{L}^T cuyas estructuras afectarán al renglón i de \mathbf{L}^T .

```
for  $i \leftarrow 1, 2, \dots, n$ 
·  $r_i \leftarrow \emptyset$ 

for  $i \leftarrow 1, 2, \dots, n$ 
·  $l_i \leftarrow a_i$ 
· for each  $j \in r_i$ 
· ·  $l_i \leftarrow l_i \cup l_j \setminus \{i\}$ 
· if  $l_i \neq \emptyset$ 
· ·  $p \leftarrow \min\{j \in l_i\}$ 
· ·  $r_p \leftarrow r_p \cup \{i\}$ 
```

Después de crear la estructura de \mathbf{L}^T se procede a crear la estructura de \mathbf{L} .

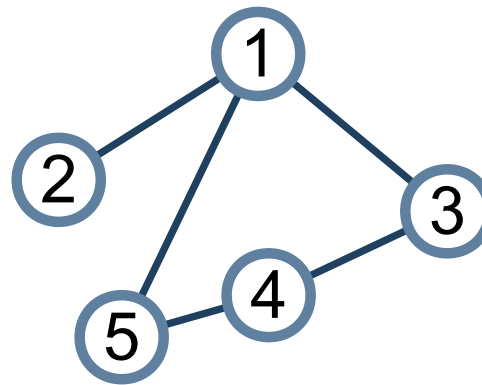
Este algoritmo de factorización simbólica es muy eficiente, la complejidad en tiempo y espacio es de orden $O(\eta(\mathbf{L}))$.

Matrices dispersas como grafos

Un grafo está formado por un conjunto de vértices y un conjunto de aristas $G=(V, E)$.

- Los vértices están numerados, V es el conjunto de todos los vértices.
- Cada arista conecta dos vértices. El conjunto de aristas E está formado por pares no ordenados de vértices. Los grafos en los cuales no importa el orden se llaman grafos no dirigidos.

Por ejemplo:



En este caso, el conjunto de vértices es

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5\},$$

el conjunto de aristas es

$$E = \{(1, 2), (1, 3), (1, 5), (3, 4), (4, 5)\}.$$

Una matriz dispersa con estructura simétrica se puede representar como un grafo no dirigido.

Sea \mathbf{A} una matriz dispersa de tamaño $n \times n$.

Cada vértice del grafo de \mathbf{A} representa un renglón (columna) de la matriz, $V = \{v_1, v_2, \dots, v_n\}$.

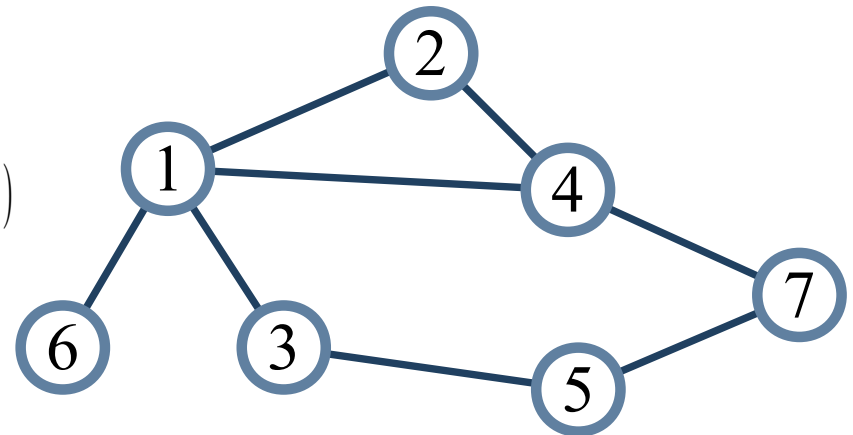
El número de aristas es igual al número de entradas no cero de la matriz $\eta(\mathbf{A})$, así $E = \{e_1, e_2, \dots, e_{\eta(\mathbf{A})}\}$.

Cada entrada no cero de la matriz $a_{ij} \neq 0$ es representada con una arista $e_k = (v_i, v_j)$, con $k = 1, 2, \dots, \eta(\mathbf{A})$.

Ejemplo:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 5 & 1 & 0 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 2 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 0 & 9 & 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 2 & 0 & 11 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 11 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

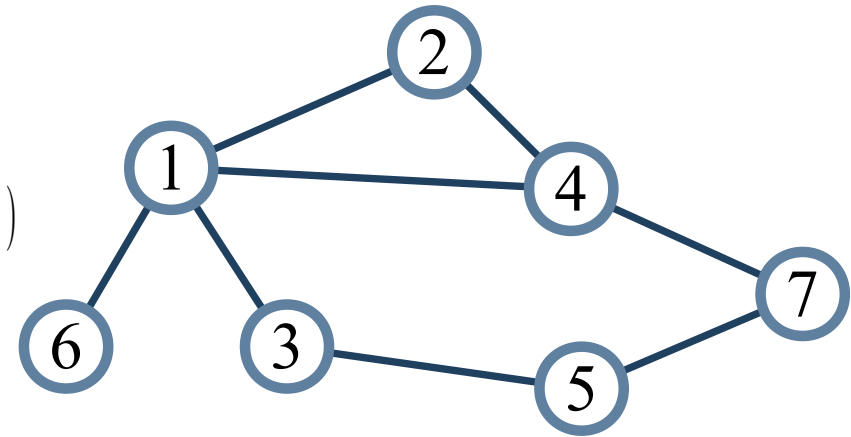
$$G^{\mathbf{A}} = (V, E)$$



En el grafo no están representados los valores de la matriz, **sólo la estructura** que forman las entradas distintas de cero.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

$$G^{\mathbf{A}} = (V, E)$$



En este caso, el conjunto de vértices es

$$V = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7\},$$

el conjunto de aristas es

$$E = \{\{1, 2\}, \{1, 3\}, \{1, 4\}, \{1, 6\}, \{2, 4\}, \{3, 5\}, \{4, 7\}, \{5, 7\}\}.$$

Adyacencia

Dos nodos $u, v \in V$ en un grafo $G = (V, E)$ son adyacentes si $\{u, v\} \in E$.

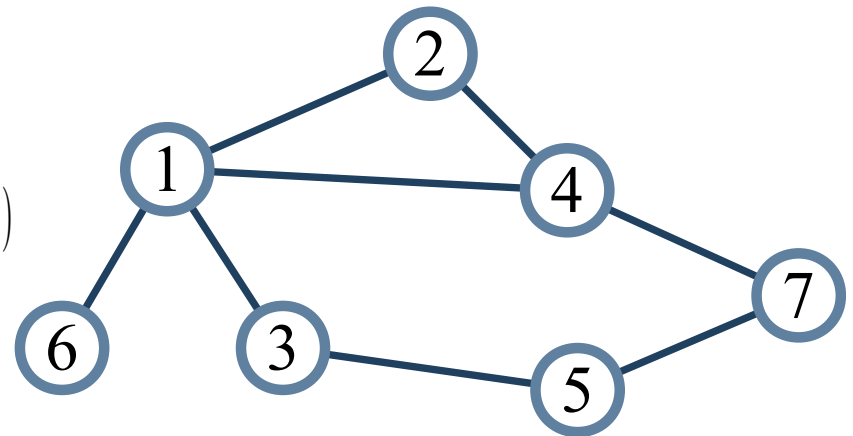
Para $v \in V$, el **conjunto adyacente** de u , denotado $\text{adj}(\{u\})$ ó $\text{adj}(u)$, es

$$\text{adj}(u) = \{v \in V \setminus \{u\} \mid \{u, v\} \in E\}.$$

Por ejemplo: $\text{adj}(4) = \{1, 2, 7\}$, $\text{adj}(6) = \{1\}$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

$$G^A = (V, E)$$



Las adyacencias de un nodo equivalen a las entradas no-cero de un renglón fuera de la diagonal.

Para $U \subset V$, el **conjunto adyacente** de U , denotado como $\text{adj}(U)$, es

$$\text{adj}(U) = \{v \in V \setminus U \mid \{u, v\} \in E \text{ para algún } u \in U\}.$$

Por ejemplo: $\text{adj}(\{5, 7\}) = \{3, 4\}$.

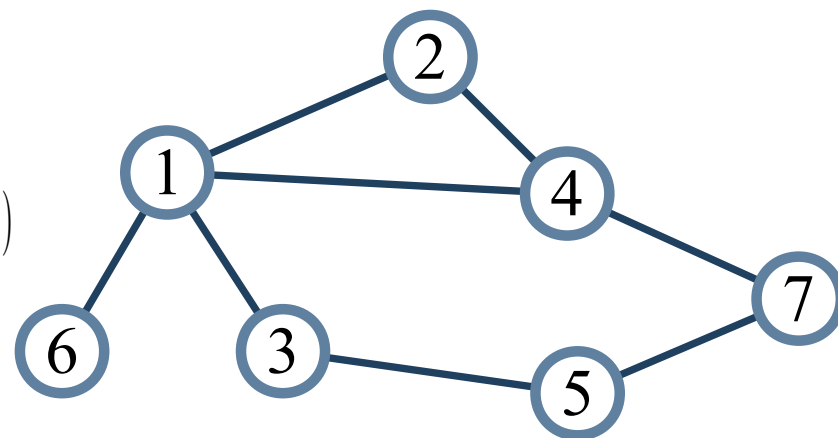
Grado

Para $U \subset V$, el **grado** de U , denotado por $\text{gr}(U)$, es simplemente el número $|\text{adj}(U)|$, donde $|S|$ denota el número de miembros del conjunto S .

En el caso de que se trate de un solo elemento, consideraremos $\text{gr}(\{u\}) \equiv \text{gr}(u)$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

$$G^{\mathbf{A}} = (V, E)$$



Por ejemplo:

$$\text{adj}(4) = \{1, 2, 7\}, \text{gr}(4) = 3.$$

Por ejemplo:

$$\text{adj}(\{5, 7\}) = \{3, 4\}, \text{gr}(\{5, 7\}) = 2.$$

El grado de un nodo equivale al número de entradas de un renglón fuera de la diagonal.

Factorización simbólica como transformación de grafos

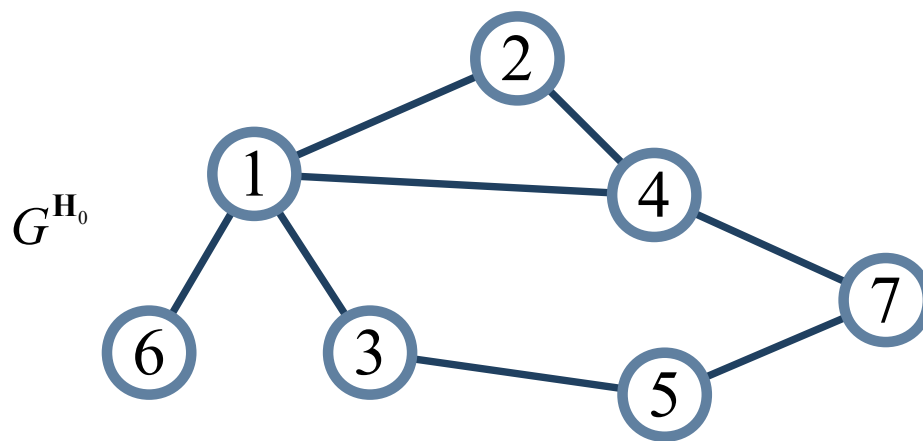
Ésta puede ser vista como una secuencia de grafos de eliminación [Geor81 pp92-100].

Vamos a continuación a encontrar, para una matriz rala \mathbf{A} , las entradas no cero de su factorización Choleksy \mathbf{L} .

Dada $\mathbf{H}_0 = \mathbf{A}$, podemos establecer una correspondencia entre una transformación de \mathbf{H}_0 a \mathbf{H}_1 como los cambios correspondientes en sus respectivos grafos.

Denotamos la estructura de la matriz \mathbf{H}_i por el grafo $G^{\mathbf{H}_i}$.

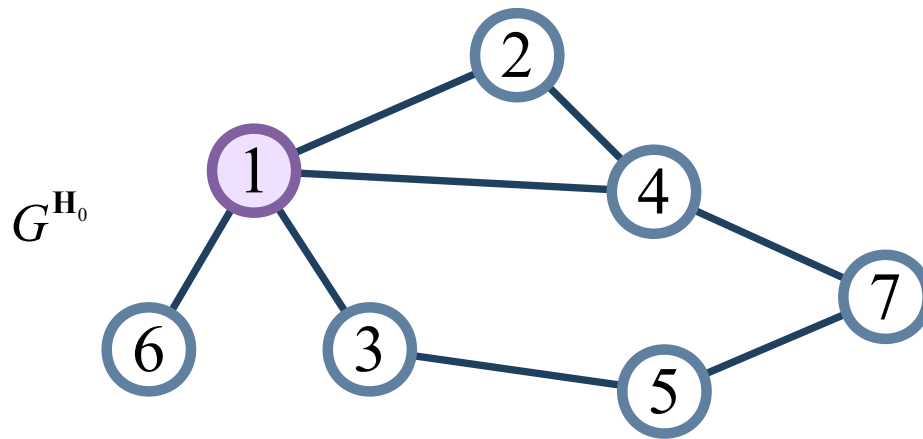
Así, para \mathbf{H}_0 tenemos $G^{\mathbf{H}_0}$,



$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

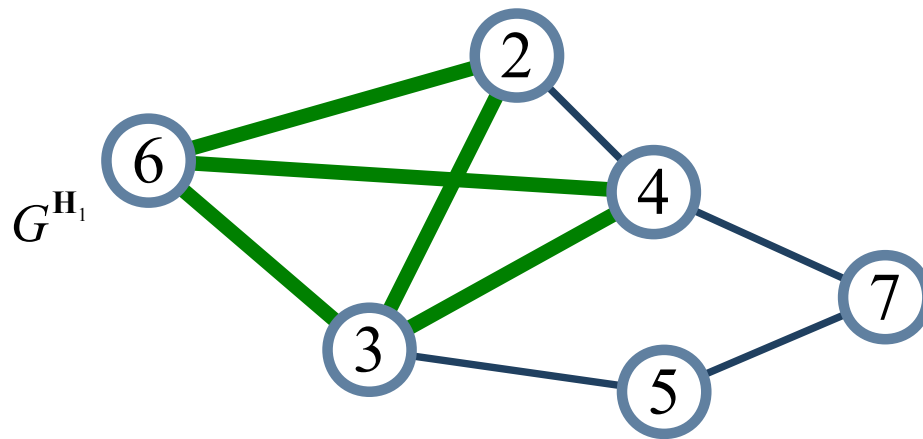
El algoritmo es...

1) Eliminar el vértice ① y sus aristas incidentes.



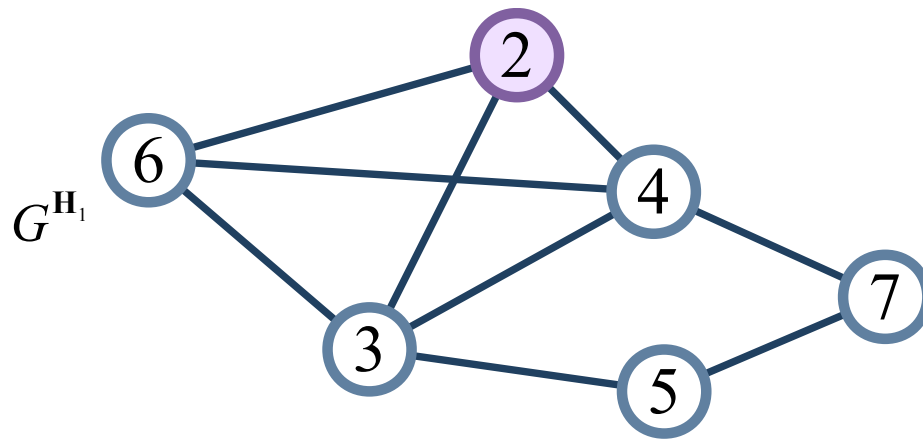
$$\mathbf{H}_0 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

2) Agregar las aristas al grafo tal que los nodos en $\text{adj}(1)$ sean pares adyacentes en G^{H_1} .



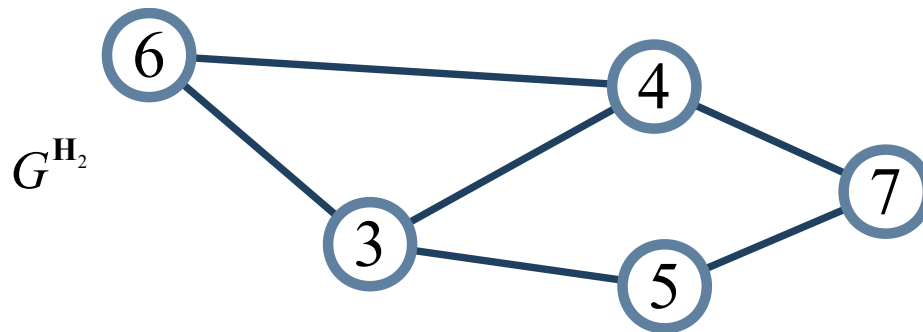
$$\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

1) Eliminar el vértice ② y sus aristas incidentes.



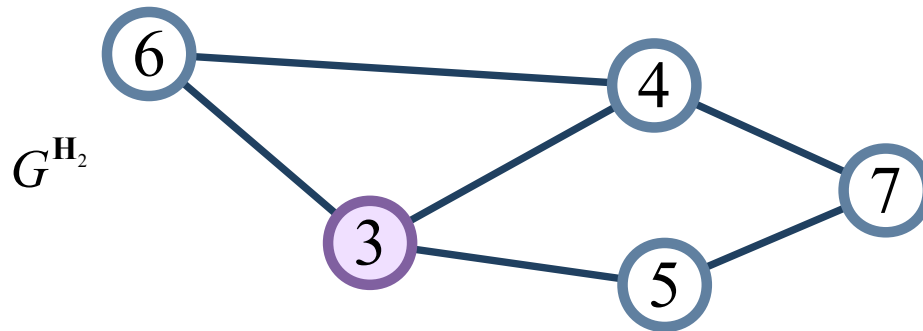
$$\mathbf{H}_1 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

2) Agregar las aristas al grafo tal que los nodos en $\text{adj}(2)$ sean pares adyacentes en G^{H_2} .



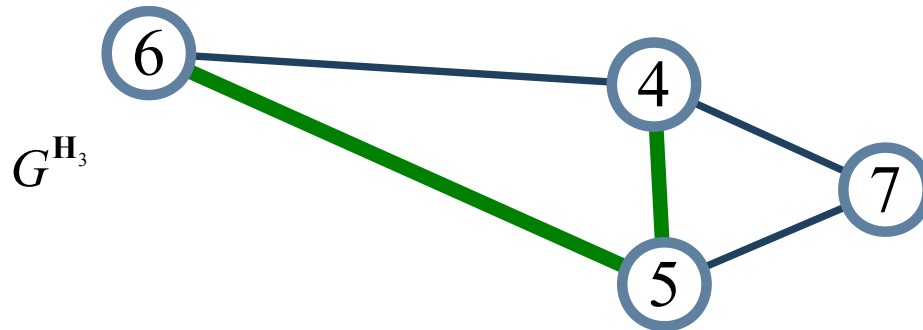
$$\mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

1) Eliminar el vértice 3 y sus aristas incidentes.



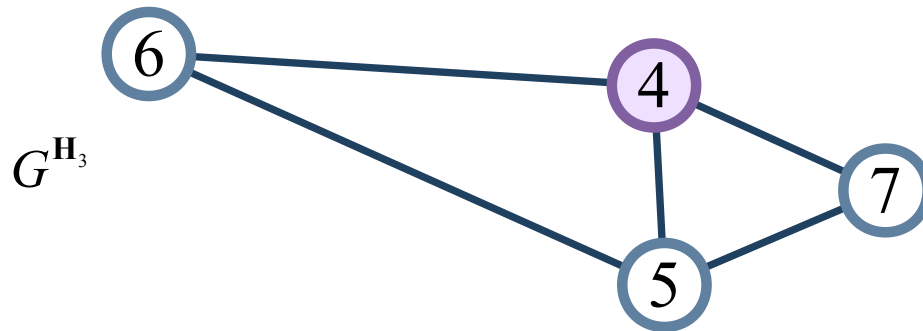
$$\mathbf{H}_2 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

2) Agregar las aristas al grafo tal que los nodos en $\text{adj}(3)$ sean pares adyacentes en G^{H_3} .



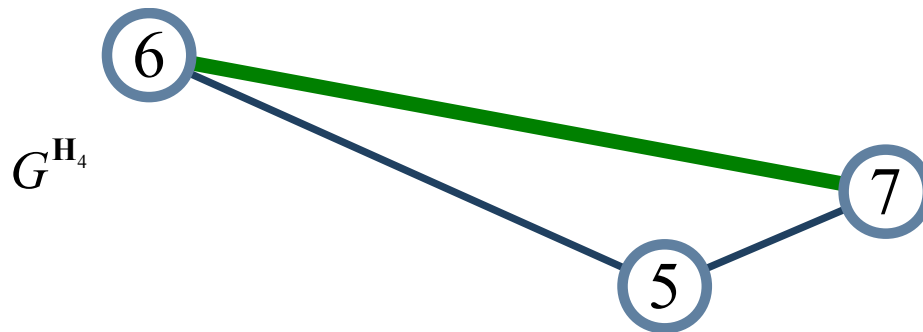
$$\mathbf{H}_3 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

1) Eliminar el vértice 4 y sus aristas incidentes.



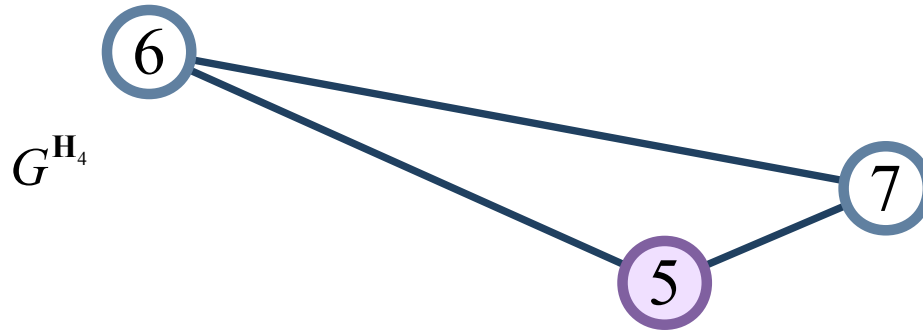
$$\mathbf{H}_3 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

2) Agregar las aristas al grafo tal que los nodos en $\text{adj}(4)$ sean pares adyacentes en G^{H_4} .



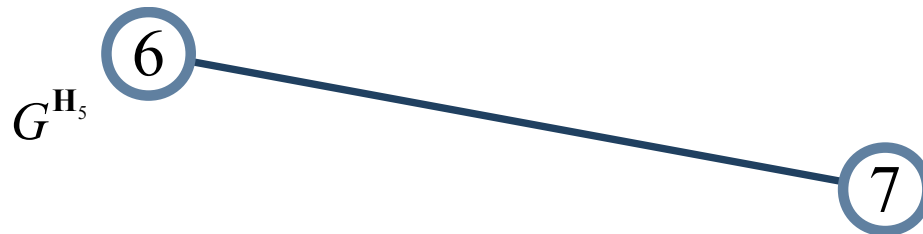
$$\mathbf{H}_4 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

1) Eliminar el vértice 5 y sus aristas incidentes.



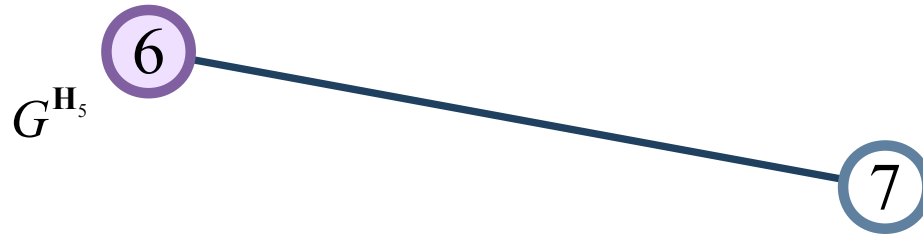
$$\mathbf{H}_4 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

2) Agregar las aristas al grafo tal que los nodos en $\text{adj}(5)$ sean pares adyacentes en G^{H_5} .



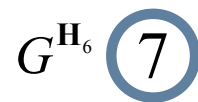
$$\mathbf{H}_5 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

1) Eliminar el vértice 6 y sus aristas incidentes.



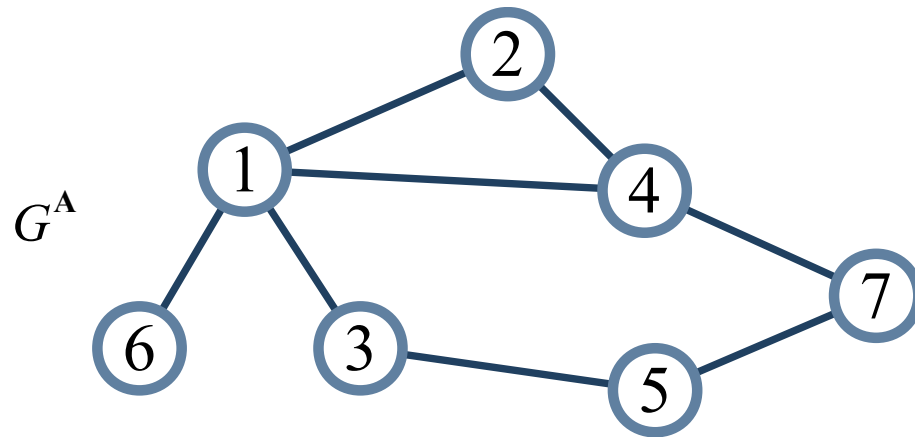
$$\mathbf{H}_5 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

2) Agregar las aristas al grafo tal que los nodos en $\text{adj}(6)$ sean pares adyacentes en G^{H_6} .



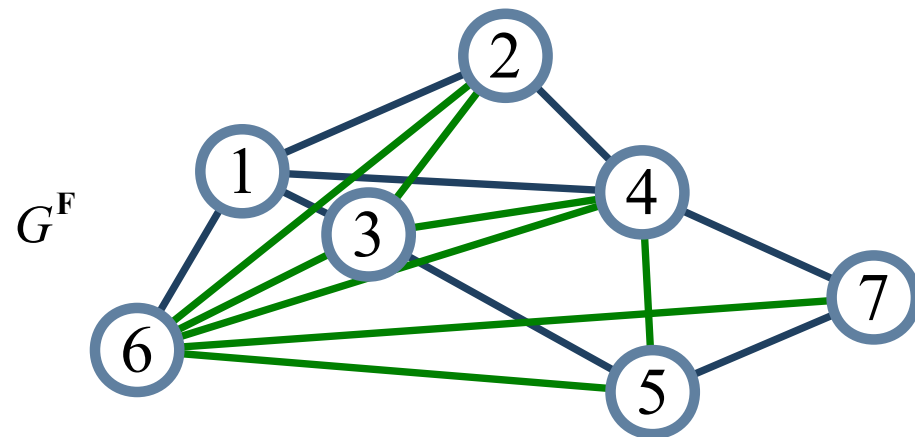
$$\mathbf{H}_6 = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

El grafo de $G^A = (V^A, E^A)$ es



$$A = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \cdot & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot & \bullet \\ \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

Definamos el llenado de G^A como el grafo simétrico $G^F = (V^F, E^F)$, resultante de la secuencia de eliminación.



$$F = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix}$$

Así el conjunto de aristas E^F consiste de todas las aristas en E^A junto con todas las aristas agregadas durante la factorización. Obviamente $V^F = V^A$.

Sea \mathbf{L} la matriz triangular resultante de la factorización Cholesky de la matriz \mathbf{A} . La estructura de \mathbf{L} será igual la parte triangular inferior de \mathbf{F} .

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \cdot \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{pmatrix} \quad \mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet & \bullet \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \bullet \end{pmatrix}$$

Así sólo tendremos que calcular las entradas de \mathbf{L} y \mathbf{L}^T donde haya un \bullet .

Llenado de las entradas de L

Utilizaremos compresión por renglones [Saad03 p362]. Para nuestro ejemplo, para \mathbf{A} es

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 5 & 1 & 0 & 3 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 0 & 2 & 0 & 4 & 0 & 0 \\ 1 & 5 & 0 & 9 & 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 4 & 0 & 2 & 0 & 11 \\ 3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 6 & 11 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

El factor \mathbf{L} será

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & L_{44} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_{53} & L_{54} & L_{55} & 0 & 0 \\ L_{61} & L_{62} & L_{63} & L_{64} & L_{65} & L_{66} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_{74} & L_{75} & L_{76} & L_{77} \end{pmatrix}$$

Las fórmulas para determinar los valores de \mathbf{L} son

$$L_{ij} = \frac{1}{L_{jj}} \left(A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} L_{jk} \right), \text{ para } i > j;$$

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

No queremos ni leer, ni escribir ceros, entonces, para compresión por renglones, usaremos

$$L_{ij} = \frac{1}{L_{jj}} \left(A_{ij} - \sum_{\substack{k \in (J_i(\mathbf{L}) \cap J_j(\mathbf{L})) \\ k < j}} L_{ik} L_{jk} \right), \text{ para } i > j;$$

$$L_{jj} = \sqrt{A_{jj} - \sum_{\substack{k \in J_j(\mathbf{L}) \\ k < j}} L_{jk}^2}.$$

Nótese que para la multiplicación $L_{ik} L_{jk}$ sólo se multiplicarán las entradas de los renglones i y j que tengan el mismo índice de columna k , es decir

$$k \in (J_i(\mathbf{L}) \cap J_j(\mathbf{L})).$$

Por ejemplo, para calcular L_{65} ,

$$L_{65} = \frac{1}{L_{55}} \left(A_{65} - \sum_{\substack{k \in (J_6(\mathbf{L}) \cap J_5(\mathbf{L})) \\ k < 5}} L_{6k} L_{5k} \right)$$

en

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{21} & L_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & L_{44} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & L_{53} & L_{54} & L_{55} & \cdot & \cdot \\ L_{61} & L_{62} & L_{63} & L_{64} & \underline{L_{65}} & L_{66} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & L_{74} & L_{75} & L_{76} & L_{77} \end{pmatrix},$$

con $J_6(\mathbf{L}) = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$ y $J_5(\mathbf{L}) = \{3, 4, 5\}$, tenemos

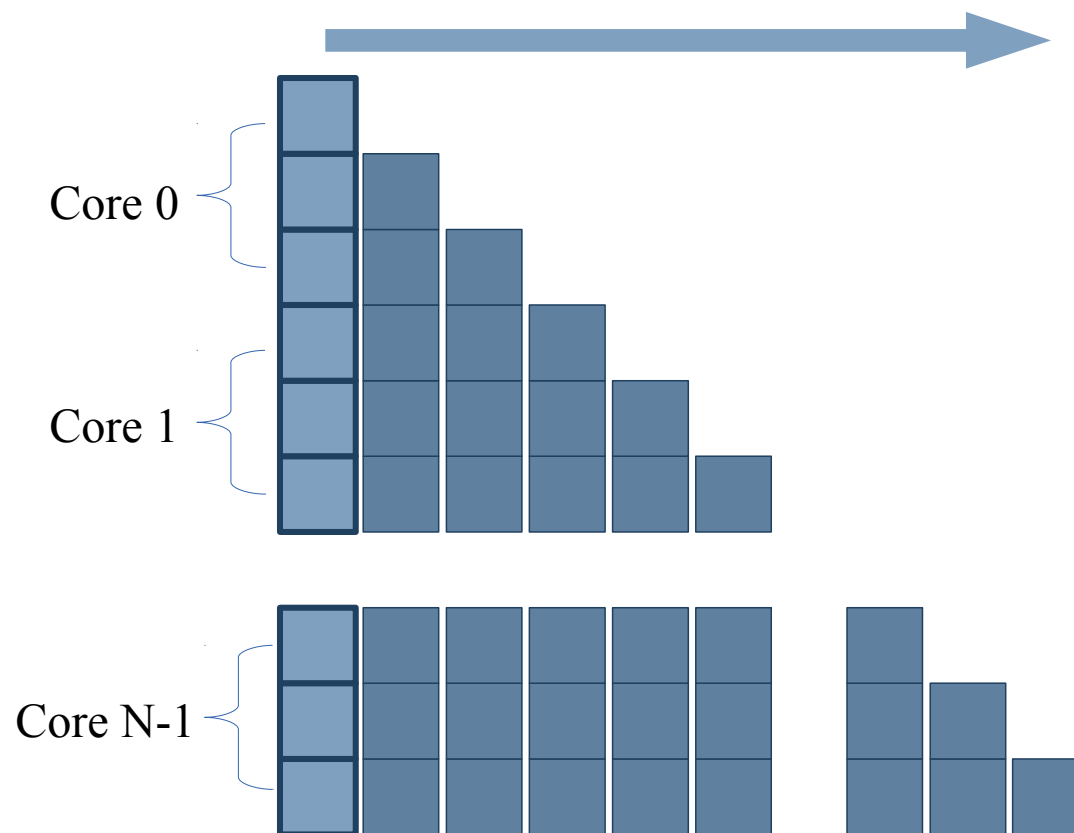
$$J_6(\mathbf{L}) \cap J_5(\mathbf{L}) = \{1, 2, 3, 4, 5, 6\} \cap \{3, 4, 5\} = \{3, 4, 5\},$$

además, con la restricción de $k < 5$, el cálculo será sólo

$$L_{65} = \frac{1}{L_{55}} (A_{65} - L_{63} L_{53} - L_{64} L_{54}).$$

Paralelización

Se puede paralelizar el algoritmo de la factorización Cholesky llenando columna por columna de L , paralelizando en los renglones [Heat91 pp442-445].



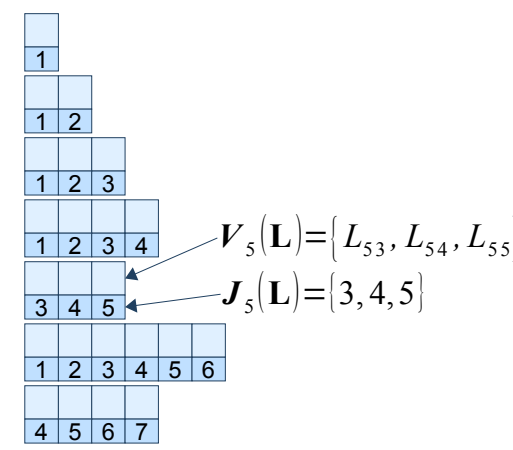
El cálculo las n entradas de L_{i1} , se repartirá entre todos los cores.

Después el cálculo de las $n-1$ entradas L_{i2} , se repartirá entre todos los cores...

... Y así sucesivamente.

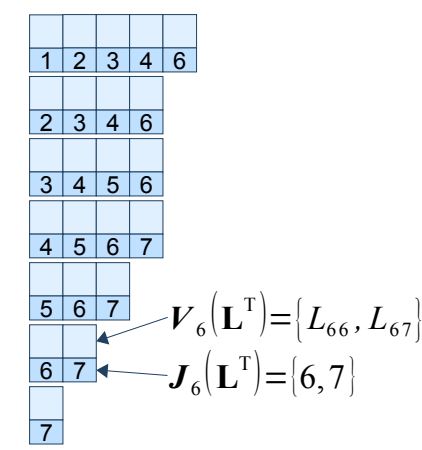
Ahora tenemos un problema, vamos a llenar por columna, $L_{ij} = \frac{1}{L_{jj}} \left(A_{ij} - \sum_{\substack{k \in (J_i(\mathbf{L}) \cap J_j(\mathbf{L})) \\ k < j}} L_{ik} L_{jk} \right)$.

pero utilizando compresión por renglones no es fácil encontrar entradas por columna.

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & L_{44} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & L_{53} & L_{54} & L_{55} & 0 & 0 \\ L_{61} & L_{62} & L_{63} & L_{64} & L_{65} & L_{66} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_{74} & L_{75} & L_{76} & L_{77} \end{pmatrix}$$


$V_5(\mathbf{L}) = \{L_{53}, L_{54}, L_{55}\}$
 $J_5(\mathbf{L}) = \{3, 4, 5\}$

La solución es llenar \mathbf{L} y \mathbf{L}^T al mismo tiempo, así podremos determinar la L_{ij} que sigue con \mathbf{L}^T .

$$\mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} L_{11}^T & L_{12}^T & L_{13}^T & L_{14}^T & 0 & L_{16}^T & 0 \\ 0 & L_{22}^T & L_{23}^T & L_{24}^T & 0 & L_{26}^T & 0 \\ 0 & 0 & L_{33}^T & L_{34}^T & L_{35}^T & L_{36}^T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_{44}^T & L_{45}^T & L_{46}^T & L_{47}^T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & L_{55}^T & L_{56}^T & L_{57}^T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L_{66}^T & L_{67}^T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L_{77}^T \end{pmatrix}$$


$V_6(\mathbf{L}^T) = \{L_{66}, L_{67}\}$
 $J_6(\mathbf{L}^T) = \{6, 7\}$

A continuación veremos el algoritmo...

El siguiente algoritmo calcula al mismo tiempo \mathbf{L} y \mathbf{L}^T :

for $j \leftarrow 1, 2, \dots, n$

- $L_{jj} \leftarrow A_{jj}$

- $q_{\max} \leftarrow |\mathbf{J}_j(\mathbf{L})| - 1$

- for $q \leftarrow 1, 2, \dots, q_{\max}$

- • $L_{jj} \leftarrow L_{jj} - \mathbf{V}_j^q(\mathbf{L}) \mathbf{V}_j^q(\mathbf{L})$

- $L_{jj} \leftarrow \sqrt{L_{jj}}$

- $L_{jj}^T \leftarrow L_{jj}$

- $q_{\max} \leftarrow |\mathbf{J}_j(\mathbf{L}^T)|$

- parallel for $q \leftarrow 2, 3, \dots, q_{\max}$

- • $i \leftarrow \mathbf{J}_j^q(\mathbf{L}^T)$

- • $L_{ij} \leftarrow A_{ij}$

- • $r \leftarrow 1$

- • $s \leftarrow 1$

- • $\rho \leftarrow \mathbf{J}_i^r(\mathbf{L})$

- • $\sigma \leftarrow \mathbf{J}_j^s(\mathbf{L})$

A_{jj} tiene que ser buscada en el renglón j de \mathbf{A}

q_{\max} guarda el número de entradas distintas de cero antes de la diagonal del renglón j de \mathbf{L} .

Calcular L_{jj} , con los valores del renglón j .

Sacar la raíz y almacenar la entrada L_{jj} .

Almacenar también la entrada L_{jj}^T .

Ahora q_{\max} guarda el número de entradas distintas de cero después de la diagonal del renglón j de \mathbf{L}^T . El ciclo en q se paraleliza.

El siguiente i se obtiene del renglón j de \mathbf{L}^T .

A_{ij} tiene que ser buscada en el renglón i de \mathbf{A} .

r y s sirven para recorrer los renglones i y j .

ρ y σ almacenarán los índices r -ésimo y s -ésimo de los renglones i y j .

· · repeat

· · · while $\rho < \sigma$
· · · · $r \leftarrow r+1$
· · · · $\rho \leftarrow J_i^r(\mathbf{L})$

· · · while $\rho > \sigma$
· · · · $s \leftarrow s+1$
· · · · $\sigma \leftarrow J_j^s(\mathbf{L})$

· · · while $\rho = \sigma$
· · · · if $\rho = j$
· · · · · exit repeat
· · · · $L_{ij} \leftarrow L_{ij} - V_i^r(\mathbf{L}) V_j^s(\mathbf{L})$
· · · · $r \leftarrow r+1$
· · · · $\rho \leftarrow J_i^r(\mathbf{L})$
· · · · $s \leftarrow s+1$
· · · · $\sigma \leftarrow J_j^s(\mathbf{L})$

· · $L_{ij} \leftarrow \frac{L_{ij}}{L_{jj}}$
· · $L_{ji}^T \leftarrow L_{ij}$

Esta sección incrementa r si el índice ρ es menor que σ . Para que esta estrategia funcione, se requiere que los índices estén ordenados.

Esta sección incrementa s si el índice σ es menor que ρ . Para que esta estrategia funcione, se requiere que los índices estén ordenados.

Si los índices ρ y σ son iguales, entonces se realiza la multiplicación de los valores r -ésimo y s -ésimo de los renglones i y j .

Se pasan a los siguientes índices de ambos renglones. Para que esta estrategia funcione, se requiere que los índices estén ordenados.

La condición de paro es si ρ tiene el índice de la entrada en la diagonal del renglón j .

Se calcula el valor final de L_{ij} y de su transpuesta L_{ji}^T .

Para la matriz \mathbf{L} del ejemplo,

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{21} & L_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & L_{44} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & L_{53} & L_{54} & L_{55} & \cdot & \cdot \\ L_{61} & L_{62} & L_{63} & L_{64} & L_{65} & L_{66} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & L_{74} & L_{75} & L_{76} & L_{77} \end{pmatrix}.$$

Las fórmulas $\rho \leftarrow \mathbf{J}_i^r(\mathbf{L})$, da los siguientes valores para $i=5$:

r	ρ
1	3
2	4
3	5

La fórmula $\sigma \leftarrow \mathbf{J}_j^s(\mathbf{L})$, da los siguientes valores para $j=7$:

s	σ
1	4
2	5
3	6
4	7

Sustituciones hacia adelante y hacia atrás para matrices ralas

Sustituyendo en $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$ la factorización $\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{L}^T$, tenemos

$$\mathbf{L} \mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{b},$$

hagamos $\mathbf{c} = \mathbf{L}^T \mathbf{x}$ y entonces tendremos dos sistemas de ecuaciones

$$\mathbf{L} \mathbf{c} = \mathbf{b},$$

$$\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{c}.$$

Con $\mathbf{L} \mathbf{c} = \mathbf{b}$ se resuelve para \mathbf{c} haciendo una sustitución hacia adelante con

$$c_i = \frac{1}{L_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{k \in J_i(\mathbf{L}) \\ k < i}} L_{ik} c_k \right)$$

y con $\mathbf{L}^T \mathbf{x} = \mathbf{c}$ resolvemos para \mathbf{x} sustituyendo hacia atrás con

$$x_i = \frac{1}{L_{ii}^T} \left(c_i - \sum_{\substack{k \in J_i(\mathbf{L}^T) \\ k > i}} L_{ik}^T x_k \right).$$

Algoritmo completo

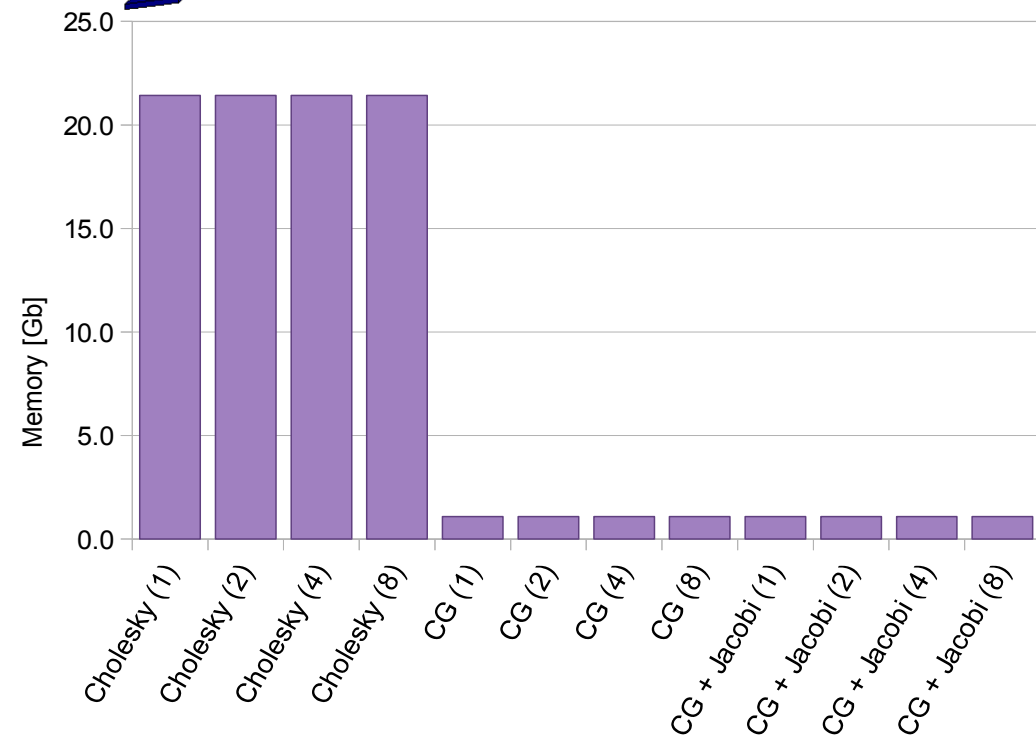
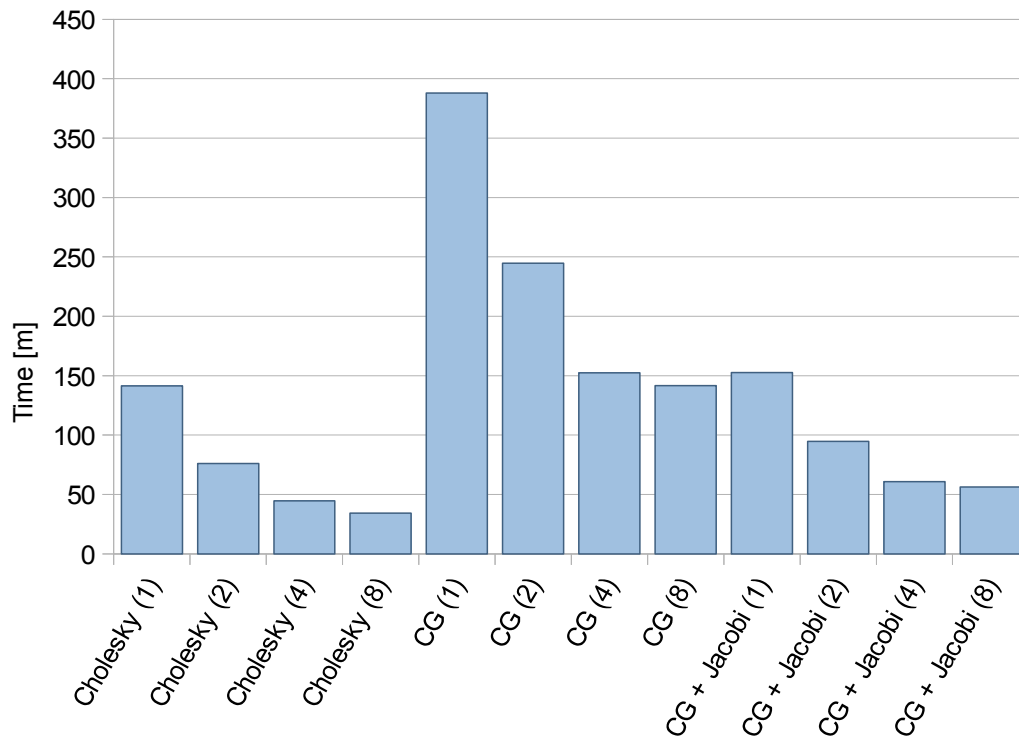
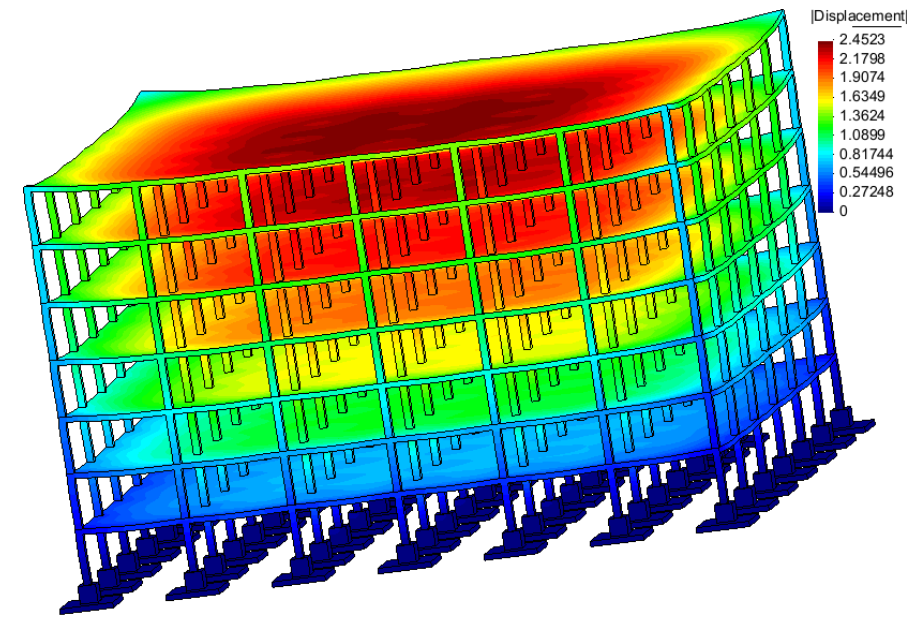
1. Encontrar la factorización Cholesky simbólica de \mathbf{A} para crear la estructura de \mathbf{L}^T con compresión por renglones.
2. Crear la estructura de \mathbf{L} usando compresión por renglones a partir de la estructura de \mathbf{L}^T . Se necesita contar el número de entradas por columna recorriendo toda \mathbf{L}^T .

$$\mathbf{L}^T = \begin{pmatrix} L_{11}^T & L_{12}^T & L_{13}^T & L_{14}^T & 0 & L_{16}^T & 0 \\ 0 & L_{22}^T & L_{23}^T & L_{24}^T & 0 & L_{26}^T & 0 \\ 0 & 0 & L_{33}^T & L_{34}^T & L_{35}^T & L_{36}^T & 0 \\ 0 & 0 & 0 & L_{44}^T & L_{45}^T & L_{46}^T & L_{47}^T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & L_{55}^T & L_{56}^T & L_{57}^T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L_{66}^T & L_{67}^T \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & L_{77}^T \end{pmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_{11} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{21} & L_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{41} & L_{42} & L_{43} & L_{44} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & L_{53} & L_{54} & L_{55} & \cdot & \cdot \\ L_{61} & L_{62} & L_{63} & L_{64} & L_{65} & L_{66} & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & L_{74} & L_{75} & L_{76} & L_{77} \end{pmatrix}$$

3. Utilizar el algoritmo para calcular los valores distintos de cero en las entradas de \mathbf{L} y \mathbf{L}^T .
4. Hacer las sustituciones hacia adelante y hacia atrás para resolver el sistema de ecuaciones $\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{b}$.

Ejemplo

Problem	Building
Elements	264,250
Nodes	326,228
Equations	978,684
nnz(A)	69,255,522
nnz(L)	787,567,656
Solver tolerance	1e-5



¿Preguntas?

migueltvargas@cimat.mx

Referencias

- [Gall90] K. A. Gallivan, M. T. Heath, E. Ng, J. M. Ortega, B. W. Peyton, R. J. Plemmons, C. H. Romine, A. H. Sameh, R. G. Voigt, *Parallel Algorithms for Matrix Computations*, SIAM, 1990.
- [Geor81] A. George, J. W. H. Liu. *Computer solution of large sparse positive definite systems*. Prentice-Hall, 1981.
- [Heat91] M T. Heath, E. Ng, B. W. Peyton. *Parallel Algorithms for Sparse Linear Systems*. SIAM Review, Vol. 33, No. 3, pp. 420-460, 1991.
- [Quar00] A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri. *Numerical Mathematics*. Springer, 2000.
- [Saad03] Y. Saad. *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*. SIAM, 2003.