5. előadás

Lineáris algebra numerikus módszerei

Definíció

Az $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrix LU-felbontásán a mátrix

$$A = L \cdot U$$

szorzatra bontását értjük, ahol $L \in \mathbb{R}^{n\times n}$ alsó, $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$ pedig felső háromszögmátrix.

Állítás

Az LU-felbontás nem egyértelmű.

Bizonyítás

Ha D egy nemszinguláris diagonális mátrix, akkor

$$L_1 \cdot U_1 = L_1 \cdot \left(DD^{-1}\right) \cdot U_1 = (L_1 D) \cdot \left(D^{-1} U_1\right) = L_2 \cdot U_2.$$

Megjegyzések

- Ha A nemszinguláris, igazolható, hogy egyetlen LU-felbontásból az összes többi csak ilyen módon származtatható.
- Amennyiben A nemszinguláris és van egy $A = L \cdot U$ szorzatra bontása, akkor olyan $A = \tilde{L} \cdot \tilde{U}$ faktorizációt is találunk, melyben az $\tilde{L}$ vagy $\tilde{U}$ főátlóbeli elemeit tetszőlegesen, de 0-tól különböző számként előírjuk.
- Ilyenkor közbeszúrjuk azt a (DD^{-1})-et, amely $D = diag(d_{1,}, d_2, \ldots, d_n)$ elemeire $d_i = \tilde{u}_{ii}/u_{ii}$, ha ott az $\tilde{U}$ főátlóbeli eleme van $\tilde{u}_{ii}$-nek megadva, és $d_j = \tilde{l}_{jj}/l_{jj}$, ha a j-edik helyen az $\tilde{L}$ főátlóbeli elemét írjuk elő.

Megjegyzések

- Ebből az is következik, hogy ha van LU-felbontása A-nak, akkor egyértelműen van olyan is, ahol az L (vagy az U) minden főátlóbeli eleme 1-es. Az ilyen háromszögmátrixokat **egység (alsó vagy felső) háromszögmátrixoknak** nevezzük.

Tétel

Egy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nemszinguláris mátrixnak akkor és csak akkor létezik LU-felbontása, ha összes főminor mátrixa is nemszinguláris, azaz

$$\det\left(A_{(r)}\right) = det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1r} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2r} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{r1} & a_{r2} & \cdots & a_{rr} \end{pmatrix} \neq 0 \qquad (r = 1, \ldots, n-1).$$

Bizonyítás

Emlékezzünk a Gauss-módszer k-adik lépésére Minden $i = k + 1, \ldots, n$ és $j = k, \ldots, n$ esetén

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)}$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik} b_k^{(k)}$$

Ezt úgy is írhatjuk, hogy a Gauss-elimináció során a k-adik oszlop kinullázása úgy történik, hogy elvégezzük a $A^{(k+1)} = L_k \cdot A^{(k)}$ szorzást, ahol

Bizonyítás

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & \cdots & -l_{kk} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -l_{k+1,k} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -l_{nk} & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n},$$

ahol $l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$

Bizonyítás

Ugyanis Az $L_k \cdot A^{(k)}$ szorzás az $A^{(k)}$ első k oszlopát változatlanul hagyja, a $k+1$-ediktől kezdődően az i. sorhoz hozzáadja a k. sor $-l_{ik}$-szorosát. A Gauss-elimináció alkalmazásával belátható, hogy az L_k mátrix inverze

$$L_k^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots & \cdots & l_{kk} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & l_{k+1,k} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & l_{nk} & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n\times n},$$

Bizonyítás

A főelemkiválasztás nélküli Gauss-elimináció így felírható a következő alakban is.

$$L_{n-1} \cdot (L_{n-2} \cdot (\cdots L_1)) \cdot A = U,$$

és

$$L_1^{-1} \cdot (L_2^{-1} \cdot (\cdots L_{n-1}^{-1})) \cdot U = L \cdot U,$$

ahol L alsó háromszög mátrix, a főátlóban 1-esekkel, az U pedig felső háromszög mátrix.

Tehát az U mátrix nem más, mint a Gauss-módszer utolsó lépésében kapott $A^{(n)}$ mátrix, az L mátrix pedig az alábbi alakban irható:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{k1} & l_{k2} & l_{k3} & \cdots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{k+1,1} & l_{k+1,2} & l_{k+1,3} & \cdots & l_{k+1,k} & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \cdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{nk} & l_{n,k+1} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n \times n},$$

Az L és U mátrix elemei megkaphatóak az alábbi képletekből:

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \qquad (i \leq j)$$

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \right) \qquad (i > j)$$

Feladat

Határozzuk meg az

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 \\ 3 & -2 & 7 \\ 2 & -2 & 1 \end{bmatrix}$$

mátrix LU-felbontását!

Ha az r-edik lépésben elakad az elimináció, akkor $a_{rr}^{(r-1)} = 0$, ami azt jelenti, hogy $\det\left(A_{(r)}\right) = 0$.

He nem tesszük fel, hogy $\det\left(A_{(r)}\right) \neq 0$ minden $r = 1, \ldots, n$ estén, akkor van olyan nemszinguláris mátrix, amelynek nincs LU-felbontása. Például az

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

mátrixnak nincs LU-felbontása.

Viszont részleges főelemkiválasztást használva minden nemszinguláris A mátrix esetén sikeresen elvégezhető a Gauss-elimináció.

Mivel a sorcserék alkalmazása a sorok permutálásának felel meg, ezért kimondhatjuk a következő tételt.

Tétel

Minden $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nemszinguláris mátrixhoz létezik olyan P permutációmátrix, hogy a PA mátrixnak van LU-felbontása.

Egy alsó háromszögmátrix transzponáltja felső háromszögmátrix és ez fordítva is igaz. Felmerül a kérdés, hogy milyen mátrixoknak van olyan LU-felbontása, melyben a két tényező egymás transzponáltja.

Tétel

Ha az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix szimmetrikus és pozitív definit, akkor létezik $A = L \cdot L^T$ szorzatra bontása, ahol L alsó háromszögmátrix.

Ezt a felbontást nevezzük **Cholesky-felbontásnak**.

Néha a Cholesky-felbontást $A = U^T \cdot U$ alakban írják és vannak szoftverek (például a Matlab is ilyen), amelyek az U mátrixot állítják elő.

A Cholesky-felbontást úgy is megkaphatjuk ezen mátrixoknál, hogy elkészítjük Gauss-eliminációval az LU-felbontást, majd megkeressük azt a D diagonális mátrixot, amelynél az $(LD)\left(D^{-1}U\right)$ szorzatban az LD és az $D^{-1}U$ diagonális elemei egyenlők.

Ez azonban a műveletszámot növeli jelentősen, hisz a Cholesky-felbontásban elég az egyik tényezőt kiszámítani, ami durván fele annyi költséggel jár.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & \dots & l_{n1} \\ 0 & l_{22} & \dots & l_{n2} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & l_{nn} \end{bmatrix},$$

egyenletből

$$a_{kk} = l_{k1}^2 + l_{k2}^2 + \ldots + l_{k,k-1}^2 + l_{kk}^2$$

és

$$a_{ik} = l_{i1}l_{k1} + l_{i2}l_{k2} + \ldots + l_{i,k-1}l_{k,k-1} + l_{ik}l_{kk} \qquad (i = k+1, \ldots, n),$$

azaz

$$l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \left(l_{k1}^2 + l_{k2}^2 + \ldots + l_{k,k-1}^2\right)}$$

és

$$l_{ik} = (a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij}l_{kj})/l_{kk} \quad (i = k+1, \ldots, n).$$

A Cholesky-felbontás algoritmusa

FOR $k \leftarrow 1$ **TO** n **DO**

$$l_{kk} = \left(a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj}^2 \right)^{1/2}$$

FOR $i \leftarrow k+1$:**TO** n **DO**

$$l_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} l_{kj} \right) / l_{kk}$$

A Cholesky-felbontás költsége a fenti implementálásban

$$\frac{1}{6} n^3 + O(n^2).$$

Tekintsük az $Ax = b$ megoldását, ahol A nemszinguláris. Van olyan P permutációmátrix, hogy létezik a $PA = LU$ faktorizáció és innen azt kapjuk, hogy

$$PAx = LUx = Pb.$$

Bevezetve az $y = Ux$ új változót, végrehajtható tehát a következő:

Az egyenletrendszer megoldása LU-módszerrel

1. Határozzuk meg a $PA = LU$ felbontást.
2. Oldjuk meg az $Ly = Pb$ egyenletrendszert y-ra.
3. Oldjuk meg az $Ux = y$ egyenletrendszert x-re.

A 2. és a 3. lépésben háromszögmátrixú egyenletrendszert kell megoldani, tehát az összköltséget dominánsan az 1. lépés határozza meg. Szimmetrikus, pozitív definit A esetén az 1. lépésben természetesen a Cholesky-felbontást alkalmazzuk.

Megjegyzések

A P mátrixot nem kell előre ismernünk.

Az 1. lépésben a faktorizációt a főelemkiválasztást alkalmazó Gauss-eliminációval végezzük el, és ott regisztráljuk a sorcseréket. Ekkor egy $PAP_1 = LU$ faktorizációt végzünk és az x megoldásnál vesszük figyelembe a P_1-et. Így a fentebb leírt LU-módszer lényegében ugyanaz, mint a főelemkiválasztásos Gauss-módszer. A különbség ott jelentkezik, hogy az A-val nem párhuzamosan transzformáljuk a jobboldali b vektort, hanem azt elhalasztjuk.

A 2. lépés pontosan a b transzformációját hajtja végre.

Az LU-módszert akkor különösen előnyös használni, ha egynél több, előre nem ismert jobboldalú

$$Ax = b_1, \ Ax = b_2, \ldots, \ Ax = b_k$$

alakú egyenletrendszert kell megoldani. Ekkor elég az A mátrix LU-felbontását egyszer meghatározni, majd rendre az $Ly_i = b_i$, $Ux_i = y_i$ $(i = 1, \ldots, k)$, összesen $2k$ darab háromszögmátrixú egyenletrendszert megoldani.

Alkalmazhatjuk például mátrix invertálására, az előre rögzített $b_i = e_i$ egységvektorokkal $(i = 1, 2, \ldots, n)$. Ekkor az eljárás egyébként teljesen ekvivalens a Gauss-Jordan elimináció alkalmazásával.