Elementárne matice a Gaussova eliminácia. LU faktorizácia matice.

Ing. Gabriel Okša, CSc.

Matematický ústav
Slovenská akadémia vied
Bratislava

Stavebná fakulta STU

Obsah

Elementárne matice

- **Definícia**: Elementárna matica je dolná trojuholníková matica E rádu n s jednotkami na diagonále, ktorej všetky nenulové mimodiagonálne prvky ležia práve v jednom stĺpci pod diagonálou. $\square$
- Ak je to napr. k-ty stĺpec, potom má tvar: $e_k + (0, 0, \ldots 0, 0, m_{k+1,k}, m_{k+2,k}, \ldots, m_{n,k})^T = e_k + m_k$ (vektor e_k má k-tu zložku 1, ostatné sú nuly). Takže: $E = I + m_k\, e_k^T$, a zároveň: $e_i^T\, m_k = 0$ pre $1 \leq i \leq k$.
- Nech $x = (x_1, x_2, \ldots, x_n)^T$, $x_1 \neq 0$. Potom existuje elementárna matica E taká, že Ex je násobok e_1 (t.j. Ex má nenulovú jedine prvú zložku, ostatné zložky sú nulové). E je daná prvým stĺpcom: $(1, -x_2/x_1, -x_3/x_1, \ldots, -x_n/x_1)^T$.
- Čísla $m_{i1} = -x_i/x_1$, $2 \leq i \leq n$, sa nazývajú činitele ('multipliers'). Elementárne matice nie sú ani symetrické ani ortogonálne!

Gaussova eliminácia bez pivotizácie - 1/2

Postup: Nech je daná matica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Potom konštruujeme elementárne matice $E_1, E_2, \ldots, E_{n-1}$ tak, aby:
$E_{n-1} E_{n-2} \ldots E_1 A = U$ bola horná trojuholníková matica.

1. E_1 nuluje prvý stĺpec matice A pod a_{11}, vznikne $A^{(1)}$. Činitele sú:
   $m_{i1} = -a_{i1}/a_{11}$, $2 \leq i \leq n$.
2. E_2 nuluje druhý stĺpec matice $A^{(1)}$ pod $a_{22}^{(1)}$, vznikne $A^{(2)}$. Činitele sú:
   $m_{i2} = -a_{i2}^{(1)}/a_{22}^{(1)}$, $3 \leq i \leq n$.

$n-1$ Atď, až v kroku $n-1$ elem. matica E_{n-1} nuluje stĺpec $n-1$ matice $A^{(n-2)}$ pod $a_{n-1,n-1}^{(n-2)}$ a vznikne $A^{(n-1)} = U$. Činiteľ je jeden:
$m_{n,n-1} = -a_{n,n-1}^{(n-2)}/a_{n-1,n-1}^{(n-2)}$.

Gaussova eliminácia bez pivotizácie - 2/2

- Matica $L_1 = E_{n-1}\, E_{n-2} \dots E_1$ je dolná trojuholníková s jednotkami na diagonále (lebo je to súčin dolných troj. s 1 na diag.). Pritom platí:
  $L_1\, A = U$, takže $A = L_1^{-1}\, U \equiv L\, U$,
  pričom L_1^{-1} je opäť dolná trojuholníková matica. Takže Gaussova eliminácia počíta LU faktorizáciu (rozklad) matice A.
- **Veta**: Nech $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ má všetky vedúce hlavné minory nenulové. Potom A má jedinú LU faktorizáciu: $A = L\, U$, kde L je dolná trojuholníková matica s jednotkami na diagonále a U je horná trojuholníková matica. $\square$
- Ak diagonálne prvky L nie sú špecifikované, potom LU rozklad nie je jednoznačný.

Explicitná forma faktora L

- Keďže $E_i = I + m_i\, e_i^T$, kde $m_i = (0, 0, \ldots, 0, m_{i+1,i}, \ldots, m_{n,i})^T$, inverzia elementárnej matice má jednoduchý tvar: $E_i^{-1} = I - m_i\, e_i^T$.
- Potom $L = E_1^{-1} E_2^{-1} \cdots E_{n-1}^{-1}$ je tiež jednoduchá:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ -m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ -m_{31} & -m_{32} & 1 & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ -m_{n,1} & -m_{n,2} & \cdots & -m_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}.$$

T.j. L-faktor sa dá nájsť <u>bez explicitnej inverzie matice</u>.

Vlastný algoritmus

- Násobenie $E_k A^{(k-1)}$ mení iba riadky $(k+1)$ až n matice A:

  1. Vstup: $U = A$; $L = I$;
  2. **for** $(k = 0;\ k < n-1;\ k++)$ {
  3. **for** $(j = k+1;\ j < n;\ j++)$ {
  4. $\ell_{jk} = u_{jk}/u_{kk}$;
  5. $u_{j,k:n} = u_{j,k:n} - \ell_{jk} * u_{k,k:n}$; }
  6. }.

- Matica E_k pre k-ty krok sa nikdy neformuje explicitne - stačí poznať vektor m_k. Jeho nenulové zložky $m_{k+1,k}, \ldots, m_{n,k}$ sa zapíšu s opačným znamienkom pod diagonálu do k-teho stĺpca L.
- Matice U a L (bez jednotiek na diagonále) možno ukladať do horného a dolného trojuholníka matice A; teda maticu A nakoniec prepíšeme.
- Výpočtová zložitosť: $2\,n^3/3 + O(n^2)$ flops.

Problém eliminácie bez pivotizácie

$A = \begin{pmatrix} 0.1 \times 10^{-3} & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$; aritmetika s 3 číslicami v mantise bez ochrannej číslice:

$m_{21} = -1/10^{-4} = -10^4$;

$U = A^{(1)} = \begin{pmatrix} 0.1 \times 10^{-3} & 1 \\ 0 & -10^4 \end{pmatrix}$ $(u_{22} = 1 - 10^4 \approx -10^4)$;

$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 10^4 & 1 \end{pmatrix}$;

Ale: $L\,U = \begin{pmatrix} 0.1 \times 10^{-3} & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \neq A$ kvôli a_{22}!

Problém: <u>veľmi malý pivot</u>.
Keď sa <u>vymenia riadky</u>, problém zmizne:

$$A' = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0.1 \times 10^{-3} & 1 \end{pmatrix};\ U = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};\ L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0.1 \times 10^{-4} & 1 \end{pmatrix};$$

Čiastočná pivotizácia - 1/4

- Cieľ: Zamedziť veľký rast prvkov v redukovaných maticiach $A^{(k)}$, pretože tento rast môže viesť k "numerickému zanedbaniu" pôvodných malých prvkov, a tým ku značnej nepresnosti (nestabilite) výpočtu.
- Princíp čiastočnej pivotizácie: Pred výpočtom činiteľov v každom kroku nájsť v práve redukovanom stĺpci maximálny prvok (v absolútnej hodnote) a ten použiť ako pivot.
- Ale v kroku k treba pivot dostať do pozície $(k, k) \Rightarrow$ treba zameniť riadky k a r_k, kde r_k je taký index, pre ktorý:

$$|a_{r_k,k}^{(k-1)}| = \max_{k \le i \le n} \{|a_{i,k}^{(k-1)}|\}.$$

Výmena riadkov k a r_k je ekvivalentná násobeniu $P_k A^{(k-1)}$, kde P_k je permutačná matica, ktorá vznikne z identity I_n zámenou riadkov k a r_k.

Čiastočná pivotizácia - 2/4

Po nájdení pivota a výmene riadkov algoritmus pokračuje ako v prípade bez pivotizácie - t.j. nájdu sa činitele $m_{k+1,k}, \dots, m_{n,k}$ tak, aby po vynásobení $M_k\, P_k\, A^{(k-1)}$ vznikla matica $A^{(k)}$, ktorá má v k-tom stĺpci pod diagonálou nuly.

1. Nájdi premutáciu P_1 tak, aby $P_1\, A$ mala na pozícii $(1, 1)$ prvok $a_{r_1,1}$ z prvého stĺpca s najväčšou absolútnou hodnotou. Nájdi elementárnu maticu E_1 tak, aby $E_1\,(P_1\, A) = A^{(1)}$ mala nuly v prvom stĺpci pod diagonálou. Ulož index r_1 a činitele $m_{21}, \dots, m_{n1}$.
2. Nájdi premutáciu P_2 tak, aby $P_2\, A^{(1)}$ mala na pozícii $(2, 2)$ prvok $a_{r_2,2}$ z druhého stĺpca s najväčšou absolútnou hodnotou. Nájdi elementárnu maticu E_2 tak, aby $E_2\,(P_2\, A^{(1)}) = A^{(2)}$ mala nuly v druhom stĺpci pod diagonálou. Ulož index r_2 a činitele $m_{32}, \dots, m_{n2}$.

Čiastočná pivotizácia - 3/4

$n-1$ Atď, až v kroku $n-1$ Nájdi premutáciu P_{n-1} tak, aby $P_{n-1}\,A^{(n-2)}$ mala na pozícii $(n-1, n-1)$ prvok $a^{(n-2)}_{r_{n-1},n-1}$ zo stĺpca $(n-1)$ s najväčšou absolútnou hodnotou.
Nájdi elementárnu maticu E_{n-1} tak, aby $E_{n-1}\,(P_{n-1}\,A^{(n-2)}) = A^{(n-1)} = U$ mala nuly v stĺpci $(n-1)$ pod diagonálou. Ulož index r_{n-1} a činiteľ $m_{n,n-1}$.

Permutačné matice P_k netreba explicitne počítať - stačí do pomocného vektora ukladať za sebou indexy r_k, ktoré identifikujú výmenu riakov k a r_k v k-tom kroku algoritmu.
Na konci výpočtu máme:
$E_{n-1}\,P_{n-1}\ldots E_1\,P_1\,A = U$.
Dá sa ukázať, že toto je v podstate LU faktorizácia permutovanej matice $P\,A$: $P\,A = L\,U$,
kde: $P = P_{n-1}\,P_{n-2}\,\ldots P_1$ a $L = (E_{n-1}\,P_{n-1}\ldots E_1\,P_1)^{-1}$.

Čiastočná pivotizácia - 4/4

Algoritmus pre čiastočnú pivotizáciu:

1. Vstup: $U = A$; $L = I$; pomocný vektor p;
2. **for** $(k = 0;\ k < n - 1;\ k++)$ $\{$
3. Vyber i, $k \le i \le n$ tak, aby $|u_{ik}|$ bolo maximálne;
4. $u_{k,k:n} \leftrightarrow u_{i,k:n}$; // vymeň riadky k a i matice U
5. $p[k] = i$; // zapíš index aktuálnej permutácie
6. **for** $(j = k + 1;\ j < n;\ j++)$ $\{$
7. $\ell_{jk} = u_{jk}/u_{kk}$;
8. $u_{j,k:n} = u_{j,k:n} - \ell_{jk} * u_{k,k:n}$; $\}$

Matice U a L (bez jednotiek na diagonále) možno ukladať do horného a dolného trojuholníka matice A; teda maticu A nakoniec prepíšeme.

Úplná pivotizácia

- V kroku k sa pivot (t.j. prvok s najväčšou abs. hodnotou) hľadá v celej podmatici matice $A^{(k-1)}$ pod prvými $k-1$ riadkami. Ak je tento pivot $a_{rs}^{(k-1)}$, potom sa do pozície (k,k) dostane zámenou riadkov k a r a zámenou stĺpcov k a s.
- Prechod $(k-1) \to k$: $A^{(k)} = E_k\,(P_k\,A^{(k-1)}\,Q_k)$, kde P_k je permutácia riadkov, Q_k je permutácia stĺpcov a E_k je elementárna matica, ktorá nuluje prvky $P_k\,A^{(k-1)}\,Q_k$ v stĺpci k pod diagonálou.
- Na konci výpočtu máme:
  $E_{n-1}\,P_{n-1}\ldots E_1\,P_1\,A\,Q_1\ldots Q_{n-1} = U$. Dá sa ukázať, že toto je v podstate LU faktorizácia permutovanej matice $P\,A\,Q$:
  $P\,A\,Q = L\,U$, kde: $P = P_{n-1}\,P_{n-2}\,\ldots P_1$,
  $Q = Q_1\,Q_2\,\ldots Q_{n-1}$ a $L = (E_{n-1}\,P_{n-1}\ldots E_1\,P_1)^{-1}$.

Stabilita Gaussovej eliminácie - 1/2

- Stabilita sa v tomto prípade "meria" rastom prvkov v redukovaných maticiach $A^{(k)}$.
  Faktor rastu ρ je pomer najväčšieho prvku (v abs. hodnote) matíc A, $A^{(1)}, \ldots, A^{(n-1)}$ k najväčšiemu prvku (v abs. hodnote) matice A.
- Aj keď pivotizácia zabezpečí, že činitele sú v abs. hodnote < 1, to nevylučuje rast prvkov v $A^{(k)}$!
- **Veta**: Pre Gaussovu elimináciu s úplnou pivotizáciou platí:

$$\rho \leq \{n \cdot 2^1 \cdot 3^{1/2} \cdot 4^{1/3} \cdots n^{1/(n-1)}\}^{1/2}, \tag{1}$$

  a pre čiastočnú pivotizáciu je $\rho \leq 2^{n-1}$. □
- Pre Gaussovu elimináciu bez pivotizácie môže byť faktor rastu ľubovoľne veľký okrem špeciálnych prípadov (napr. symetrické pozitívne definitné matice).

Stabilita Gaussovej eliminácie - 2/2

- Pravá strana v (1) je pomaly rastúca funkcia n a v praxi sa dosiahnutie tejto hornej hranice nikdy nepozorovalo. Preto sa Gaussova eliminácia (GE) s úplnou pivotizáciou považuje za stabilný algoritmus. Ale v praxi sa používa zriedkavo, pretože je náročný na hľadanie pivotov.
- Pre čiastočnú pivotizáciu sa dajú skonštruovať matice, pre ktoré sa dosiahne faktor rastu 2^{n-1}. Napr., Wilkinson (1965): $a_{ij} = 1$ pre $j = i, n$; $a_{ij} = -1$ pre $j < i$; inak $a_{ij} = 0$. Tieto prípady sú v praxi veľmi zriedkavé, a preto sa v praxi považuje GE s čiastočnou pivotizáciou za stabilný algoritmus. Je to najčastejšie používaný variant GE v praxi.
- GE bez pivotizácie je pre všeobecnú maticu A nestabilný algoritmus. Používa sa napr. pre symetrické pozitívne definitné matice.

Cvičenie

1. Naprogramujte v jazyku C LU faktorizáciu matice A pomocou Gaussovej eliminácie bez pivotizácie.
2. Naprogramujte v jazyku C LU faktorizáciu matice A pomocou Gaussovej eliminácie s čiastočnou pivotizáciou.