Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Video na Youtube

GEM a více pravých stran

- s výhodou lze využít toho, že přímý chod, který je mnohem pomalejší než zpětný
- přímý chod lze provést s několika pravými stranami současně aniž by se výpočet výrazně zpomalil
- zpětný chod sice musím provést pro každou pravou stranu zvlášť, ale je řádově rychlejší než přímý, takže to tolik nevadí
- v praxi ale bohužel většinou pravé strany získáváme postupně, tj. po vyřešení soustavy s jednou pravou stranou jsme schopni napočítat další pravou stranu
- ukážeme si metodu, která umí novou pravou stranu rychle převést na tvar vhodný pro zpětný chod – jde vlastně o *LU* **rozklad**

GEM a LU rozklad

- ukázali jsme si, že výsledek GEM je rozklad $\mathbb{A} = \mathbb{M}^{-1}\mathbb{U} = \mathbb{L}\mathbb{U}$
- dostáváme tak

$$\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b} \Leftrightarrow \mathbb{L}\mathbb{U}\vec{x} = \vec{b}$$

- označíme-li

$$\mathbb{U}\vec{x} = \vec{d}$$

dostáváme

$$\mathbb{L}\vec{d} = \vec{b}$$

GEM a LU rozklad

- úlohu $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ jsem převedli na úlohu
  - $\mathbb{A} = \mathbb{L}\mathbb{U}$
  - $\mathbb{L}\vec{d} = \vec{b}$
  - $\mathbb{U}\vec{x} = \vec{d}$
- jelikož matice $\mathbb{L}$ a $\mathbb{U}$ jsou trojúhelníkové, je vyřešení soustav v druhém a třetím kroku velmi rychlé ($O(n^2)$)
- první krok má složitost n^3 (bude vidět později), ale je nezávislý na pravé straně $\vec{b}$
- rozklad matice na horní a dolní trojúhelníkovou se většinou označuje jako *LU* rozklad podle *lower and upper triangular matrix*
- ukážeme si, jak získat LU rozklad pomocí GEM

GEM a LU rozklad

- zajímá nás, jak vypadá matice $\mathbb{L} = \mathbb{M}^{-1}$
- víme, že $\mathbb{M}$ se rovná součinu matic $\mathbb{M}^{(k)}$, které reprezentují všechny elementární úpravy provedené v k-tém kroku přímého chodu tj.

$$\mathbb{M} = \mathbb{M}^{(n)}\mathbb{M}^{(n-1)}\ldots\mathbb{M}^{(1)}$$

- a tedy je

$$\mathbb{M}^{-1} = \left(\mathbb{M}^{(1)}\right)^{-1}\left(\mathbb{M}^{(2)}\right)^{-1}\ldots\left(\mathbb{M}^{(n)}\right)^{-1}$$

- nyní nás tedy zajímá, jak získat inverzní matici $\left(\mathbb{M}^{(k)}\right)^{-1}$ pro k-tý krok přímého chodu

GEM a LU rozklad

- ze vztahu $\mathbb{M}^{(k)} = \mathbb{M}_n^{(k)} \dots \mathbb{M}_k^{(k)}$ plyne

$$\left(\mathbb{M}^{(k)}\right)^{-1} = \left(\mathbb{M}_k^{(k)}\right)^{-1} \dots \left(\mathbb{M}_n^{(k)}\right)^{-1}$$

- budou nás tedy zajímat inverzní matice k maticím elementárních úprav

GEM a LU rozklad

- matice $\mathbb{M}_k^{(k)}$ odpovídá elementární úpravě vydělení k-tého řádku číslem $a_{kk}^{(k-1)}$

$$
\mathbb{M}_k^{(k)} = \begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
& \ddots & & & & & \\
& & 1 & & & & \\
& & & \frac{1}{a_{kk}^{(k-1)}} & & & \\
& & & & 1 & & \\
& & & & & \ddots & \\
& & & & & & 1
\end{pmatrix}
$$

GEM a LU rozklad

- k ní inverzní matice tedy musí odpovídat opačné elementární úpravě, tj. násobení k-tého řádku stejným číslem
- platí tedy

$$\left(\mathbb{M}_k^{(k)}\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & a_{kk}^{(k-1)} & & & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

GEM a LU rozklad

- matice $\mathbb{M}_i^{(k)}$ pro $i > k$ odpovídá elementární úpravě odečtení $a_{ik}^{(k-1)}$ násobku k-tého řádku od i-tého

$$\mathbb{M}_i^{(k)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & -a_{ik}^{(k-1)} & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

GEM a LU rozklad

- k ní inverzní matice tedy musí odpovídat opačné elementární úpravě, tj. přičtení $a_{ik}^{(k-1)}$ násobku k-tého řádku k i-tému
- platí tedy

$$\left(\mathbb{M}_i^{(k)}\right)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & a_{ik}^{(k-1)} & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

GEM a LU rozklad

- ze znalosti inverzních matic k jednotlivým elementárním úpravám již můžeme získat inverzní matici k matici vyjadřující elementární úpravy v k-tém kroku přímého chodu
- jelikož $\mathbb{M}^{(k)} = \mathbb{M}_n^{(k)} \dots \mathbb{M}_k^{(k)}$, platí, že

$$\left(\mathbb{M}^{(k)}\right)^{-1} = \left(\mathbb{M}_k^{(k)}\right)^{-1} \left(\mathbb{M}_{k+1}^{(k)}\right)^{-1} \dots \left(\mathbb{M}_n^{(k)}\right)^{-1}$$

- již víme, že při součinu matic $\left(\mathbb{M}_{k+1}^{(k)}\right)^{-1} \dots \left(\mathbb{M}_n^{(k)}\right)^{-1}$ vlastně provádíme "sjednocení" nenulových prvků všech matic

GEM a LU rozklad

- je tedy $\left(\mathbb{M}_k^{(k)}\right)^{-1} \dots \left(\mathbb{M}_n^{(k)}\right)^{-1} =$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & a_{k,k}^{(k-1)} & & & \\ & & a_{k+1,k}^{(k-1)} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & a_{n,k}^{(k-1)} & & & 1 \end{pmatrix}$$

- dále platí, že $\mathbb{M}^{-1} = \left(\mathbb{M}^{(1)}\right)^{-1} \left(\mathbb{M}^{(2)}\right)^{-1} \dots \left(\mathbb{M}^{(n)}\right)^{-1}$

GEM a LU rozklad

Lemma 1

Pro $i < j$ platí

$$
\begin{pmatrix}
1 & & & & & \\
& \ddots & & & & \\
& & a_{ii} & & & \\
& & a_{i+1,i} & 1 & & \\
& & \vdots & & \ddots & \\
& & \vdots & & & \ddots \\
& & a_{ni} & & & & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
1 & & & & & \\
& \ddots & & & & \\
& & 1 & & 0 & \\
& & & \ddots & & \\
& & & & b_{jj} & \\
& & & & b_{j+1,j} & 1 & \\
& & & & \vdots & & \ddots \\
& & & & b_{nj} & & & 1
\end{pmatrix}
=
$$

$$
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & & \\
& \ddots & & & & & & \\
& & a_{ii} & & & & & \\
& & a_{i+1,i} & 1 & & & & \\
& & & & \ddots & & & \\
& & \vdots & & & 1 & & \\
& & & & & & b_{jj} & \\
& & \vdots & & & & b_{j+1,j} & 1 & \\
& & & & & & \vdots & & \ddots \\
& & a_{ni} & & & & b_{nj} & & & 1
\end{pmatrix}.
$$

GEM a LU rozklad

Z předchozího lemmatu dostáváme, že

$$\mathbb{M}^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & & & & & & \\ a_{21} & a_{22}^{(1)} & & & & & \\ a_{31} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(2)} & & & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & & & \\ a_{k1} & a_{k2}^{(1)} & \dots & a_{k,k-1}^{(k-2)} & a_{kk}^{(k-1)} & & \\ \vdots & \vdots & & & & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2}^{(1)} & \dots & \dots & \dots & \dots & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}$$

GEM a LU rozklad

- při výpočtu LU rozkladu je dobré využít faktu, že nemusíme ukládat jedničky na diagonále horní trojúhelníkové matice
- tím získáváme dostatek prostoru pro uložení dolní trojúhelníkové matice
- v praxi opravdu v paměti počítače pracujeme jen s jednou maticí, která na počátku obsahuje prvky matice $\mathbb{A}$ a s tím, jak nulujeme její prvky pod diagonálou získáváme volné místo pro prvky dolní trojúhelníkové matice
- pokud se nyní podíváme na prvky matice $\mathbb{M}^{-1}$, vidíme, že jsou to přesně prvky, které vznikají pod diagonálou během přímého chodu GEM
- k získání LU rozkladu nám tak vlastně stačí nenulovat prvky pod diagonálou během přímého chodu GEM
- při GEM si tak ušetříme práci a jako bonus získáme LU rozklad pro případ, že bychom řešili stejnou soustavu jen s jinou pravou stranou
- v literatuře se tak často místo GEM mluví o LU rozkladu, jsou to vlastně ekvivalentní úlohy, ale LU rozklad je o něco rychlejší a užitečnější

GEM a LU rozklad

```
for( int k = 0; k < n; k++ )
{
   /****
    * Deleni k-teho radku pivotem
    */
   for( int i = n-1; i > k; i-- )
   {
      A[ k ][ i ] = A[ k ][ i ] / A[ k ][ k ];
   }

   /****
    * Uprava ostatnich radku
    */
   for( int j = k+1; j < n; j++ )
   {
      /****
       * Odecitani k-teho radku od j-teho
       */
      for( int i = k+1; i < n; i++ )
      {
         A[ j ][ i ] =
            A[ j ][ i ] - A[ j ][ k ] * A[ k ][ i ];
      }
   }
}
```

LU rozklad

- máme-li napočítaný LU rozklad, lze řešit soustavu $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ se složitostí n^2, dokonce se stejným počtem operací, jako u násobení čtvercové matice a vektoru – navíc jen n dělení
- proto se LU rozklad někdy považuje za ekvivalent inverzní matice

Příklad

Example 2

Mějme matici

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \\ 4 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Provedeme její LU rozklad

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \\ 4 & 2 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & -6 & -12 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 18 \end{pmatrix} \sim$$

$$\sim \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Příklad

$$\mathbb{M}^k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \frac{1}{a_{kk}^{(k-1)}} & & & \\ & & & -\frac{a_{k+1,k}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & 1 & & \\ & & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -\frac{a_{nk}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & & & 1 \end{pmatrix}, (\mathbb{M}^k)^{-1} \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & a_{k,k}^{(k-1)} & & \\ & & a_{k+1,k}^{(k-1)} & 1 & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & a_{n,k}^{(k-1)} & & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbb{M}^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -4 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \mathbb{M}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & -6 & 1 \end{pmatrix}, \mathbb{M}^3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{18} \end{pmatrix}$$

$$(\mathbb{M}^1)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \end{pmatrix}, (\mathbb{M}^2)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & -6 & 1 \end{pmatrix}, (\mathbb{M}^3)^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 18 \end{pmatrix}$$

Příklad

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ \frac{4}{9} & \frac{-1}{3} & \frac{1}{18} \end{pmatrix}, \mathbb{M}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ 4 & -6 & 18 \end{pmatrix},$$

$$\mathbb{A} = \mathbb{M}^{-1}\mathbb{U} = \mathbb{L}\mathbb{U} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & -1 & 0 \\ 4 & -6 & 18 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Nechť $\vec{b} = (6, 6, 6)^T$, pak řešíme $A\vec{x} = \vec{b}$ jako $\mathbb{L}\mathbb{U}\vec{x} = \vec{b}$, tj.

$$\mathbb{U}\vec{x} = \vec{d}, \mathbb{L}\vec{d} = \vec{b}.$$

Dostáváme

$$\vec{d} = (6, 6, 1)^T, \vec{x} = (1, 1, 1)^T.$$

Kompaktní schéma pro LU faktorizaci

- je také známé jako Croutova nebo Doolittlova faktorizace
- vychází ze vztahu

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min(i,j)} l_{ik} u_{kj}$$

- a předpokládáme, že $u_{ii} = 1$ pro $i = 1, \ldots, n$ – Croutova metoda
- pro $j = 1$ a $i = 1, \ldots n$ je

$$a_{i1} = l_{i1} u_{11} \Rightarrow l_{i1} = a_{i1}$$

- pro $i = 1$ a $j = 2, \ldots n$ je

$$a_{1j} = l_{11} u_{1j} = u_{1j} \Rightarrow u_{1j} = a_{i1} / l_{11}$$

Kompaktní schéma pro LU faktorizaci

- pro $j = 2$ a $i = 2, \dots n$

$$a_{i2} = l_{i1} u_{12} + l_{i2} u_{22} \Rightarrow l_{i2} = a_{i2} - l_{i1} u_{12}$$

- pro $i = 2$ a $j = 3, \dots, n$ je

$$a_{2j} = l_{21} u_{1j} + l_{22} u_{2j} \Rightarrow u_{2j} = (a_{2j} - l_{21} u_{1j}) / l_{22}$$

Kompaktní schéma pro LU faktorizaci

- obecně tak vidíme, že pro pevně daný sloupec j a $i = j, \ldots, n$ je

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} l_{ik} u_{kj} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ij} u_{jj} \Rightarrow l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}$$

- a pro pevně daný řádek i a $j = i + 1, \ldots n$ je

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} l_{ik} u_{kj} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ii} u_{ij} \Rightarrow u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}) / l_{ii}$$

Kompaktní schéma pro LU faktorizaci

- algoritmus lze provést, pokud jsou diagonální prvky matice $\mathbb{L}$ nenulové
  - tato matice ale z jednoznačnosti LU rozkladu musí být stejná, jako matice $\mathbb{L}$ z GEM a ta má na diagonále pivoty z GEM, tj. předpoklady pro oba algoritmy jsou stejné
- prvky LU rozkladu se u této metody napočítají v jednom kroku a neprochází postupným přepočítáváním jako u GEM – to napomáhá lepší přesnosti
- GEM ale umožňuje pivoting
- jakmile napočítáme prvek l_{ij} nebo u_{ij} nepotřebujeme už znát a_{ij}
- rozklad lze tudíž napočítat tak, že postupně přepisujeme matici $\mathbb{A}$ a nepotřebujeme paměť navíc

Kompaktní schéma pro LU faktorizaci

- ze vztahů

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \text{ pro } j \leq i$$

a

$$u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}) / l_{ii} \text{ pro } i < j$$

je vidět, že prvky u_{ij} a l_{ij} závisí spojitě na a_{ij}

Theorem 3

Prvky matic $\mathbb{L}$ a $\mathbb{U}$ z LU rozkladu jsou spojitou funkcí prvků matice $\mathbb{A}$.

Kompaktní schéma pro LU faktorizaci

```
for( int step = 0; step < n; step++ )
{
   const int j = step;
   /****
    * Napocitej j-ty sloupec matice L (pod diagonalou vcetne)
    */
   for( int i = step; i < n; i++ )
   {
      double aux( 0.0 );
      for( int k = 0; k < j; k++ )
         aux += A[ i ][ k ] * A[ k ][, j ];
      A[ i ][ j ] -= aux;
   }

   /****
    * Napocitej i-ty radek matice U (za diagonalou)
    */
   for( int j = step + 1; j < n; j++ )
   {
      const int i = step;
      double aux( 0.0 );
      for( int k = 0; k < i; k++ )
         aux += A[ i ][ k ] * A[ k ][ j ];
      A[ i ][ j ] -= aux;
      A[ i ][ j ] /= A[ i ][ i ];
   }
}
```

Kompaktní schéma pro LU faktorizaci

Example 4

Napočítejte LU rozklad matice

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \\ 4 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

pomocí Croutovy metody.

Příklad

- LU rozklad pomocí GEM je implementován v programech `lu-solver` a `lu-test`
  - `--input-file` matice.mtx
    - soubor ve formátu `mtx` se vstupní maticí
    - pro `lu-solver` pravá strana se napočítá tak, aby řešením byl vektor ze samých jedniček
  - `--method gem/crout`
    - volba metody
  - `--verbose n`
    - nastavuje úroveň vypisovaných informací v průběhu výpočtu

Příklad

- program `lu-test` porovnává přesnost LU rozkladu tak, že nakonec vynásobí matice $\mathbb{L}$ a $\mathbb{U}$ a napočítá normu rozdílu od matice $\mathbb{A}$

```
bin/lu-test --input-file data/matrix-1.mtx --verbose 3 --method gem
bin/lu-test --input-file data/matrix-1.mtx --verbose 3 --method crout
bin/lu-test --input-file data/matrix-2.mtx --verbose 3 --method gem
bin/lu-test --input-file data/matrix-2.mtx --verbose 3 --method crout
```

- program `lu-solver` nejprve vypočítá LU rozklad a pomocí něj následně řeší soustavu se zadanou maticí
- slouží jako názorná ukázka toho, jak dlouho trvá výpočet LU rozkladu, což přesně odpovídá délce běhu GEM, oproti využití již napočítaného LU rozkladu
- to je ovšem poznat až na větších maticích

```
bin/lu-solver --input-file data/sherman-5.mtx --method gem
```

LU rozklad pro symetrické matice - Choleského rozklad

Theorem 5

Je-li matice $\mathbb{A}$ hermitovská a pozitivně definitní, pak existuje její hermitovský symetrický rozklad, tj.

$$\mathbb{A} = \mathbb{S}^*\mathbb{S},$$

kde matice $\mathbb{S}$ je horní trojúhelníková.

Důkaz.

Video na Youtube □

Tomuto rozkladu se říká **Choleského rozklad (dekompozice).**

LU rozklad pro symetrické matice - Choleského dekompozice

- pro jednoduchost se omezíme na symetrické matice, následující platí s malými obměnami i pro hermitovské matice
- je-li matice $\mathbb{A}$ symetrická, lze v počítači uložit jen její jednu polovinu a diagonálu
- předchozí věta říká, že pro výpočet jejího LU rozklad nebudeme potřebovat více prostoru v paměti
- při použití GEM pro LU rozklad symetrické matice stačí upravovat jen horní polovinu a na diagonále ukládat odmocniny pivotů

LU rozklad pro symetrické matice - Choleského dekompozice

- rozklad je dán vztahy

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}\overline{l_{ik}}},$$

pro $i = 1, \ldots, n$ a

$$l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}\overline{l_{jk}})/l_{ii}$$

pro $j < i \leq n$.

LU rozklad pro symetrické matice - Choleského dekompozice

Example 6

Spočítejte Choleského rozklad matice

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 25 & 15 & -5 \\ 15 & 18 & 0 \\ -5 & 0 & 11 \end{pmatrix}$$

Řešení:

$$\mathbb{L} = \begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 3 & 3 & 0 \\ -1 & 1 & 3 \end{pmatrix}$$

Otázky

- **k čemu slouží a jak lze napočítat LU rozklad**
- k čemu slouží a jak lze napočítat Choleského rozklad