

# Wstęp do metod numerycznych

## Faktoryzacja macierzy

P. F. Góra

<http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/>

2013

## Uwagi o eliminacji Gaussa

Przypuśćmy, że mamy rozwiązać kilka układów równań z tą samą lewą stroną, a różnymi wyrazami wolnymi:

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b}^{(i)}, \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (1)$$

gdzie  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ,  $\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{b}^{(i)} \in \mathbb{R}^N$ . Eliminacja Gaussa (z wyborem elementu podstawowego!) jest efektywna, jeżeli z góry znamy *wszystkie* prawe strony  $\mathbf{b}^{(1)}, \mathbf{b}^{(2)}, \dots, \mathbf{b}^{(M)}$ , gdyż w tym wypadku przeprowadzając eliminację Gaussa, możemy przekształcać wszystkie prawe strony *jednocześnie*. Całkowity koszt rozwiązania (1) wynosi wówczas  $O(N^3) + O(MN^2)$ .

Jeżeli jednak wszystkie prawe strony nie są z góry znane — co jest sytuacją typową w obliczeniach iteracyjnych — eliminacja Gaussa jest nieefektywna, gdyż trzeba by ją niepotrzebnie przeprowadzać dla każdej prawej strony z osobna, co podnosiłoby koszt numeryczny do  $O(MN^3) + O(MN^2)$ .

## Dygresja: równania macierzowe

Zauważmy, że korzystając z własności mnożenia macierzy, równania (1) można zapisać w postaci

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B} \quad (2)$$

gdzie  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ,  $\mathbf{X}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N \times M}$ , przy czym

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \dots & x_1^{(M)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \dots & x_2^{(M)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_N^{(1)} & x_N^{(2)} & \dots & x_N^{(M)} \end{bmatrix}$$

i analogicznie dla  $\mathbf{B}$ . Innymi słowy, **macierzowy układ równań (2) jest równoważny układowi równań liniowych (1) z  $M$  niezależnymi prawymi stronami.**

## Uwaga — jawna konstrukcja macierzy odwrotnej

Z powyższych uwag widać, że problem jawnej konstrukcji macierzy odwrotnej

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbb{I} \quad (3)$$

jest problemem postaci (2), a więc kolejne kolumny macierzy odwrotnej uzyskujemy rozwiązując kolejne układy (1) dla  $i = 1, 2, \dots, N$ , przy czym  $\mathbf{b}^{(1)} = [1, 0, 0, \dots]^T$ ,  $\mathbf{b}^{(2)} = [0, 1, 0, \dots]^T$  itd. Rozwiązanie układu równań  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  poprzez jawną konstrukcję macierzy odwrotnej,  $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ , wymaga rozwiązania  $N$  układów równań liniowych, co oznacza koszt  $O(2N^3)$ , podczas gdy koszt bezpośredniego rozwiązania równania  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  to  $O(N^3)$ .

Pojawiający się często we wzorach napis  $A^{-1}b$   
**zawsze** rozumiemy jako wezwanie do znalezienie  
wektora  $z$  takiego, że  $Az = b$ .

### Przykład

Wyrażenie

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{J}^{-1}\mathbf{f}_n \quad (4)$$

interpretujemy jako

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{z} \quad (5a)$$

gdzie

$$\mathbf{J}\mathbf{z} = \mathbf{f}_n \quad (5b)$$

## Faktoryzacja $LU$

Przypuśćmy, że udało nam się znaleźć faktoryzację

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}, \quad (6)$$

gdzie macierz  $\mathbf{U}$  jest trójkątna górna (wszystkie elementy poniżej głównej przekątnej są zerami), natomiast  $\mathbf{L}$  jest trójkątna dolna; dodatkowo przyjmujemy, że jej wszystkie elementy diagonalne są równe 1,  $l_{ii} = 1$ . Taką faktoryzację nazywamy *rozkładem  $LU$* .

Jeżeli rozkład  $LU$  jest znany, równanie

$$\mathbf{Ax} \equiv \mathbf{L} \underbrace{\mathbf{Ux}}_{\mathbf{y}} = \mathbf{b} \quad (7)$$

rozwiązujemy jako

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \quad (8a)$$

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y} \quad (8b)$$

Pierwsze z tych równań rozwiązujemy metodą *forward substitution*, drugie — metodą *back substitution*. Ponieważ są to równania z macierzami trójkątnymi, koszt obliczeniowy rozwiązania każdego z nich wynosi  $O(N^2)$ , a zatem koszt rozwiązania (7) wynosi  $O(2N^2)$ .

Pozostaje jeszcze “tylko” dokonać samej faktoryzacji.



## Algorytm Doolittle'a

Aby dokonać rozkładu  $LU$ , należy obliczyć  $N^2$  nieznanych elementów macierzy  $L$ ,  $U$ . Rozpiszmy (6):

$$\underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2N} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3N} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{N1} & a_{N2} & a_{N3} & \dots & a_{NN} \end{bmatrix}}_A = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \\ l_{N1} & l_{N2} & l_{N3} & \dots & 1 \end{bmatrix}}_L \underbrace{\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1N} \\ & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2N} \\ & & u_{33} & \dots & u_{3N} \\ & & & \dots & \dots \\ & & & & u_{NN} \end{bmatrix}}_U \quad (9)$$

Okazuje się, że rozwiązywanie równań na poszczególne elementy  $l_{ij}$ ,  $u_{pq}$  jest proste, jeżeli przeprowadza się je *we właściwej kolejności*, odpowiadającej kolejnym kolumnom macierzy  $A$ .

Pierwsza kolumna: Aby znaleźć pierwszą kolumnę macierzy  $A$ , mnożymy kolejne wiersze  $L$  przez pierwszą kolumnę macierzy  $U$ . **Ale ta kolumna ma tylko jeden element.** Otrzymujemy

$$\begin{array}{rcl} u_{11} & = & a_{11} \\ l_{21}u_{11} & = & a_{21} \\ l_{31}u_{11} & = & a_{31} \\ \dots & \dots & \dots \\ l_{N1}u_{11} & = & a_{N1} \end{array} \quad (10)$$

Z pierwszego z równań (10) obliczamy  $u_{11}$ , a następnie z kolejnych  $l_{21}, l_{31}, \dots, l_{N1}$ .

Druga kolumna: Wyrażenia na elementy drugiej kolumny macierzy  $A$  powstają z przemnożenia kolejnych wierszy  $L$  przez drugą kolumnę  $U$ :

$$\begin{array}{rcccccl}
 & & & u_{12} & = & a_{12} \\
 l_{21}u_{12} & + & & u_{22} & = & a_{22} \\
 l_{31}u_{12} & + & l_{32}u_{22} & = & a_{32} & \\
 \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \\
 l_{N1}u_{12} & + & l_{N2}u_{22} & = & a_{N2} & 
 \end{array} \tag{11}$$

Z pierwszego z tych równań obliczamy  $u_{12}$ . W tym momencie  $u_{12}$  jest już znane, podobnie jak obliczone wcześniej  $l_{\bullet 1}$ , a zatem z drugiego z równań (11) obliczamy  $u_{22}$ , a z kolejnych  $l_{32}, l_{42}, \dots, l_{N2}$ .

I tak dalej.

Widać, że średni koszt obliczenia któregoś z nieznanych elementów  $l_{ij}$ ,  $u_{pq}$  jest rzędu  $O(N)$ . Ponieważ elementów tych jest  $N^2$ , złożoność numeryczna algorytmu Doolittle'a wynosi  $O(N^3)$ . Całkowity koszt rozwiązania układu równań liniowych, a więc faktoryzacji  $LU$  i rozwiązania układów równań z macierzami trójkątnymi (8), jest taki sam, jak eliminacji Gaussa.

Przewaga rozkładu  $LU$  nad eliminacją Gaussa polega na tym, iż **przy pomocy rozkładu  $LU$  można rozwiązywać dowolnie wiele równań z takimi samymi lewymi stronami (macierzami)**, przy czym “kosztowną” część, a więc samą faktoryzację, oblicza się tylko raz.

Z uwagi na symetrię problemu i na **kolejność wykonywanych obliczeń**, faktoryzacja  $LU$  nie wymaga dodatkowej pamięci do zapamiętania obliczonych elementów faktoryzacji: elementy macierzy  $L$  (bez diagonali) zapamiętujemy w poddiagonalnym trójkącie macierzy  $A$ , elementy macierzy  $U$  — na diagonalu i w ponaddiagonalnym trójkącie  $A$ .

## Przykład

W celu dokonania faktoryzacji  $LU$  macierzy

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \quad (12)$$

musimy rozwiązać równania

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & \\ l_{21} & 1 & \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ & u_{22} & u_{23} \\ & & u_{33} \end{bmatrix} \quad (13)$$

ze względu na  $l_{ik}$ ,  $u_{kj}$ . W tym celu zapiszmy indywidualne równania, na jakie rozpada się (13), w kolejności odpowiadające przeglądaniu macierzy (12) kolumnami.

Pierwsza kolumna macierzy (12) odpowiada

$$u_{11} = 1 \quad (14a)$$

$$l_{21}u_{11} = 2 \quad (14b)$$

$$l_{31}u_{11} = 2 \quad (14c)$$

skąd natychmiast otrzymujemy

$$u_{11} = 1, \quad l_{21} = 2, \quad l_{31} = 2. \quad (15)$$

Zwróćmy uwagę, iż pierwsze z równań (14) służy do wyliczenia elementu macierzy  $U$ , drugie i trzecie — do wyliczenia elementów macierzy  $L$ .

Druga kolumna odpowiada

$$u_{12} = 2 \quad (16a)$$

$$l_{21}u_{12} + u_{22} = 1 \quad (16b)$$

$$l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} = 2 \quad (16c)$$

Zauważmy, że jeśli równania (16) rozwiązywać w kolejności „naturalnej”, od góry do dołu, każde z nich okazuje się być równaniem z *jedną* niewiadomą. Pierwsze dwa służą do wyliczenia elementów macierzy  $U$ , trzecie do wyliczenia elementu macierzy  $L$ . Otrzymujemy

$$u_{12} = 2, \quad u_{22} = -3, \quad l_{32} = \frac{2}{3}. \quad (17)$$

Trzecia kolumna (12) daje

$$u_{13} = 2 \quad (18a)$$

$$l_{21}u_{13} + u_{23} = 2 \quad (18b)$$

$$l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33} = 1 \quad (18c)$$

W tym wypadku wszystkie trzy równania (18) służą do obliczenia elementów macierzy  $U$ . Podobnie jak poprzednio, jeśli równania te rozwiązywać

od góry do dołu, każde z nich jest równaniem z jedną niewiadomą. Jako rozwiązanie otrzymujemy

$$u_{13} = 2, \quad u_{23} = -2, \quad u_{33} = -\frac{5}{3}. \quad (19)$$

Ostatecznie

$$\begin{bmatrix} 1 & & & \\ 2 & 1 & & \\ 2 & \frac{2}{3} & 1 & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ & -3 & -2 \\ & & -\frac{5}{3} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 \\ 2 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}. \quad (20)$$

Równość w (20) można sprawdzić bezpośrednim rachunkiem.



## Algorytm Crouta

Przedstawiony algorytm nie zawiera wyboru elementu podstawowego (pivotingu), ten zaś jest niezbędny dla stabilności całego procesu. Z uwagi na symetrie faktoryzacji, tylko częściowy wybór elementu podstawowego jest możliwy. Omówimy to na przykładzie. Rozwiązując równania (11) począwszy od drugiego z nich, obliczamy

$$\begin{aligned}l_{22}u_{22} &= a_{22} - l_{21}u_{12} & (l_{22} \equiv 1) \\l_{32}u_{22} &= a_{32} - l_{31}u_{12} \\&\dots \\l_{N2}u_{22} &= a_{N2} - l_{N1}u_{12}\end{aligned}\tag{21}$$

Porównujemy teraz wyliczone lewe strony równań (21) i wybieramy największą (na moduł) z nich; tę uznajemy za “właściwe”  $u_{22}$  — odpowiada to permutacji wierszy macierzy  $A$ . **Należy także spermutować już obliczone wiersze macierzy  $L$ .** W rezultacie otrzymujemy nie rozkład  $LU$  samej macierzy  $A$ , ale macierzy różniącej się od niej pewną permutacją wierszy.

## Przykład

Rozpatrzmy problem znalezienia następującej faktoryzacji:

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}.$$

(22)

Faktoryzację znajdujemy przechodząc macierz  $A$  *kolumnami*, poczynając

od lewego górnego rogu. Pierwsza kolumna daje zatem

$$a_{11} : \quad u_{11} = 2 \quad (23a)$$

$$a_{21} : \quad l_{21}u_{11} = 1 \quad (23b)$$

$$a_{31} : \quad l_{31}u_{11} = 0 \quad (23c)$$

$$a_{41} : \quad l_{41}u_{11} = -1 \quad (23d)$$

Po przejrzaniu pierwszej kolumny faktoryzacja ma postać

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 & 0 \\ -\frac{1}{2} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}. \quad (24)$$

Przystępujemy do przeglądania drugiej kolumny:

$$a_{12} : \quad u_{12} = 4 \quad (25a)$$

$$a_{22} : \quad \frac{1}{2} \cdot 4 + u_{22} = 2 \implies u_{22} = 0 \quad (25b)$$

$$a_{32} : \quad 0 \cdot 4 + l_{32}u_{22} = 1 \implies l_{32}u_{22} = 1 \quad (25c)$$

$$a_{42} : \quad -\frac{1}{2} \cdot 4 + l_{42}u_{22} = 1 \implies l_{42}u_{22} = 3 \quad (25d)$$

Widać, iż równań (25) nie da się rozwiązać ze względu na  $l_{32}$ ,  $l_{42}$ . Dzieje się tak dlatego, że aktualny element diagonalny („element podstawowy”) jest zerem. Aby uniknąć tej sytuacji, należy przestawić drugi wiersz faktoryzowanej macierzy z pewnym innym wierszem leżącym *poniżej* drugiego; oczywiście należy także przestawić już obliczone elementy macierzy  $L$  odpowiadające przestawianym wierszom  $A$ . Jako wiersz, który zajmie miejsce wiersza drugiego, wybieramy ten, który prowadzi do największej (na moduł) wartości po prawej stronie równań (25), jako że ta wartość stanie

się nowym elementem diagonalnym, przez który będziemy dzielić. W naszym przykładzie jest to wiersz czwarty. Zatem

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & l_{32} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & u_{13} & u_{14} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}. \quad (26)$$

Kolory wskazują co z czym było przestawiane. Podkreślam, iż w macierzy  $L$  przestawieniu podlegają tylko *już obliczone* elementy, a więc elementy leżące na lewo od aktualnie analizowanej kolumny. Ponieważ wiersze leżące powyżej aktualnie obliczanego elementu diagonalnego nie ulegają zmianie, obliczoną wartość  $u_{12}$  można już było wpisać do macierzy. Teraz

z łatwością obliczamy

$$a_{22} : \quad -\frac{1}{2} \cdot 4 + u_{22} = 1 \implies u_{22} = 3 \quad (27a)$$

$$a_{32} : \quad 0 \cdot 4 + l_{32}u_{22} = 1 \implies l_{32} = \frac{1}{3} \quad (27b)$$

$$a_{42} : \quad \frac{1}{2} \cdot 4 + l_{42}u_{22} = 2 \implies l_{42} = 0 \quad (27c)$$

a zatem

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & -1 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & u_{13} & u_{14} \\ 0 & 3 & u_{23} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}. \quad (28)$$

Przystępujemy do przeglądania trzeciej kolumny.

$$a_{13} : \quad u_{13} = 1 \quad (29a)$$

$$a_{23} : \quad -\frac{1}{2} \cdot u_{13} + u_{23} = 0 \implies u_{23} = \frac{1}{2} \quad (29b)$$

$$a_{33} : \quad 0 \cdot u_{13} + \frac{1}{3} \cdot u_{23} + u_{33} = 2 \implies u_{33} = \frac{11}{6} \quad (29c)$$

$$a_{43} : \quad \frac{1}{2} \cdot u_{13} + 0 \cdot u_{23} + l_{43}u_{33} = 3 \implies l_{43}u_{33} = \frac{5}{2} \quad (29d)$$

W tym wypadku nie *musimy* permutować wierszy (równania (29) nie zawierają dzielenia przez zero), tym niemniej *powinniśmy* to zrobić, aby elementem diagonalnym był element o możliwie największym module. Ponieważ  $5/2 > 11/6$ , permutujemy trzeci i czwarty wiersz macierzy  $\mathbf{A}$ , przedstawiając jednocześnie odpowiednie *już obliczone* elementy macierzy  $\mathbf{L}$ .

A zatem

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \\ \color{red}{1} & \color{red}{2} & \color{red}{3} & \color{red}{1} \\ \color{red}{0} & \color{red}{1} & \color{red}{2} & \color{red}{-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ \color{blue}{\frac{1}{2}} & \color{blue}{0} & 1 & 0 \\ \color{blue}{0} & \color{blue}{\frac{1}{3}} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & u_{14} \\ 0 & 3 & \frac{1}{2} & u_{24} \\ 0 & 0 & u_{33} & u_{34} \\ 0 & 0 & 0 & u_{44} \end{bmatrix}. \quad (30)$$

Jak poprzednio, kolory pokazują elementy, które zostały przestawione. Teraz z łatwością obliczamy najpierw brakujące elementy  $u_{33}$ ,  $l_{43}$ , później zaś elementy ostatniej kolumny macierzy  $U$  — w tym przypadku nie trzeba (a nawet nie da się) wykonywać już żadnych „pivotów”. Ostatecznie otrzymujemy

$$\begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & 1 & 2 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{3} & \frac{11}{15} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 4 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \\ 0 & 0 & \frac{5}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{28}{15} \end{bmatrix}. \quad (31)$$



Widać zatem, że

1. Faktoryzacja  $LU$  nie wymaga *de facto* rozwiązywania skomplikowanego układu równań, jako że każde z rozwiązywanych równań jest równaniem z jedną niewiadomą, jeśli tylko macierz  $A$  jest przeglądana we właściwej kolejności. Obliczenie jednego elementu wymaga  $\sim N$  operacji, wszystkich elementów jest  $N^2$ , zatem koszt obliczeniowy faktoryzacji  $LU$  jest rzędu  $O(N^3)$ .
2. Macierz  $A$  można przeglądać kolumnami poczynając od lewego górnego rogu, lecz jeszcze bardziej naturalna jest następująca kolejność:
  - (a) Zaczynamy od lewego górnego rogu.

- (b) Przeglądając  $k$ -tą kolumnę od pozycji diagonalnej w dół obliczamy wszystkie iloczyny  $l_{kk}u_{kk}, l_{k+1,k}u_{kk}, \dots, l_{Nk}u_{kk}$  *bez wykonywania dzielenia przez  $u_{kk}$* . Jako element podstawowy wybieramy ten z nich, który ma największą (na moduł) wartość — w tym celu przedstawiamy odpowiednie wiersze  $A$  oraz odpowiednie elementy  $L$  stojące w już obliczonych kolumnach  $(1, \dots, k-1)$ . Teraz wykonujemy dzielenie przez nowe  $u_{kk}$  ( $l_{kk} = 1$ ). Widać, że iloczynów  $l_{sk}u_{kk}, s > k$ , nie trzeba ponownie obliczać, ponieważ zostały policzone przed wybraniem elementu podstawowego.
- (c) Po przejrzaniu  $k$ -tej kolumny przeglądamy  $k$ -ty wiersz poczynając od pozycji  $k+1$  (poprzednie elementy tego wiersza zostały już obliczone przy okazji przeglądania poprzednich kolumn), jako że nie biorą one udziału w wyborze elementu podstawowego, wszystkie zaś elementy potrzebne do ich obliczenia są już w tym momencie znane.

3. Na skutek zastosowania wyboru elementu podstawowego dostajemy **nie** faktoryzację wyjściowej macierzy  $A$ , lecz faktoryzację macierzy różniącą się od macierzy wyjściowej kolejnością wierszy (porównaj lewe strony (22) i (31)). Trzeba zapamiętać tę permutację wierszy, jako że przy rozwiązywaniu równania  $Ax = b$  trzeba zastosować tę samą permutację elementów wektora  $b$ .

## Faktoryzacja Cholesky'ego

Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  będzie symetryczna,  $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}$ , i dodatnio określona:

$$\forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N, \mathbf{x} \neq 0: \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} > 0. \quad (32)$$

Wówczas istnieje alternatywa dla faktoryzacji  $LU$ : faktoryzacja postaci

$$\mathbf{A} = \mathbf{C} \mathbf{C}^T, \quad (33)$$

gdzie  $\mathbf{C}$  jest macierzą trójkątną dolną o elementach diagonalnych większych od zera. Znalezienie faktoryzacji Cholesky'ego jest mniej więcej o połowę szybsze, niż znalezienie faktoryzacji  $LU$  tej samej macierzy.

Najprostszy algorytm jest bardzo podobny do algorytmu Doolittle'a:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} c_{11} & & & & \\ c_{21} & c_{22} & & & \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} & & \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & c_{44} & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}}_C \underbrace{\begin{bmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} & c_{41} & \dots \\ & c_{22} & c_{32} & c_{42} & \dots \\ & & c_{33} & c_{43} & \dots \\ & & & c_{44} & \dots \\ & & & & \ddots \end{bmatrix}}_{C^T} = \underbrace{\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} & a_{41} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} & a_{42} & \dots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{43} & \dots \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}}_C \quad (34)$$

Pierwsza kolumna macierzy A daje

$$\begin{aligned} c_{11}^2 &= a_{11} \\ c_{21}c_{11} &= a_{21} \\ c_{31}c_{11} &= a_{31} \\ c_{41}c_{11} &= a_{41} \\ &\dots \end{aligned} \quad (35)$$

Z pierwszego z tych równań obliczamy  $c_{11}$ , z kolejnych  $c_{21}, c_{31}$  itd.

Druga kolumna daje

$$\begin{aligned}c_{11}c_{21} &= a_{21} \\c_{21}^2 + c_{22}^2 &= a_{22} \\c_{31}c_{21} + c_{32}c_{22} &= a_{32} \\c_{41}c_{21} + c_{42}c_{22} &= a_{42} \\&\dots\dots\dots\end{aligned}\tag{36}$$

Pierwsze z równań (36) jest identyczne z drugim z równań (35). Drugie z równań (36) pozwala na wyliczenie  $c_{22}$ . Dalsze równania pozwalają wyliczyć  $c_{32}$ ,  $c_{42}$  itd.

I tak dalej.

Z uwagi na symetrię problemu, przy obliczaniu faktoryzacji Cholesky'ego nie jest możliwy wybór elementów podstawowych. Z uwagi na kolejność obliczeń, obliczone czynniki Cholesky'ego można przechowywać w tym samym miejscu, co elementy pierwotnej macierzy  $A$ .

## Faktoryzacja $LDL$

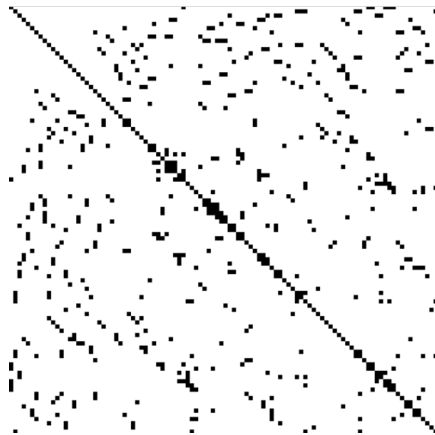
Jeżeli macierz spełnia założenia potrzebne do przeprowadzenia faktoryzacji Cholesky'ego, można także znaleźć jej inną faktoryzację:

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \mathbf{D} \mathbf{L}^T, \quad (37)$$

gdzie  $\mathbf{L}$  jest macierzą trójkątną dolną o tej własności, że  $\forall i: l_{ii} = 1$ , natomiast  $\mathbf{D}$  jest macierzą diagonalną o dodatnich elementach. Zaletą faktoryzacji  $LDL$  w stosunku do faktoryzacji Cholesky'ego jest to, iż do znalezienia  $LDL$  nie potrzeba pierwiastkować.

## Macierze rzadkie

W wielu praktycznych zastosowaniach występują **macierze rzadkie**, to znaczy takie, w których liczba elementów niezerowych rośnie wolniej niż  $N^2$ , gdzie  $N$  jest wymiarem macierzy. Na przykład w macierzy trójdzielnej liczba niezerowych elementów skaluje się jak  $O(3N)$ , a w macierzy pasmowej o  $P$  dodatkowych diagonalach jak  $O((2P + 1)N)$ . Możliwe są także inne struktury macierzy rzadkich.





## Macierze rzadkie i efektywność numeryczna

Dla efektywności numerycznej jest niesłuchanie ważne, aby zastosowany **algorytm** uwzględniał strukturę macierzy, tak, aby nie trzeba było wykonywać redundantnych mnożeń przez zero i dodawań zera, a nawet żeby nie przechodzić przez zerowe elementy.

- Dla macierzy trójdzielnej faktoryzacji  $LU$  dokonujemy w czasie liniowym,  $O(N)$ , ale za to niemożliwy jest wybór elementu podstawowego.
- Jeżeli możliwa jest faktoryzacja Cholesky'ego macierzy  $M$ -diagonalnej, także jej czynnik Cholesky'ego będzie  $M$ -diagonalny. Może jednak pojawić się niekorzystne zjawisko, zwane **wypełnieniem**: Jeżeli sama macierz ma zera “wewnątrz” pasma, jej czynnik Cholesky'ego nie musi ich mieć, co może bardzo niekorzystnie wpłynąć na wydajność numeryczną.

## Przykład

Czynnik Cholesky'ego następującej macierzy *rzadkiej*

$$\begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \dots \\ \bullet & \bullet & & & & \\ \bullet & & \bullet & & & \\ \bullet & & & \bullet & & \\ \bullet & & & & \bullet & \\ \vdots & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

(38)

(niewypełnione elementy są zerami) będzie macierzą *pełną*.

## Minimum Degree Algorithm

Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  będzie macierzą posiadającą faktoryzację Cholesky'ego, dla której zachodzi niebezpieczeństwo pojawienia się wypełnienia. Wypełnienie zależy od struktury macierzy, nie od wartości jej poszczególnych elementów. Zamiast równania

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (39a)$$

możemy rozwiązywać równanie

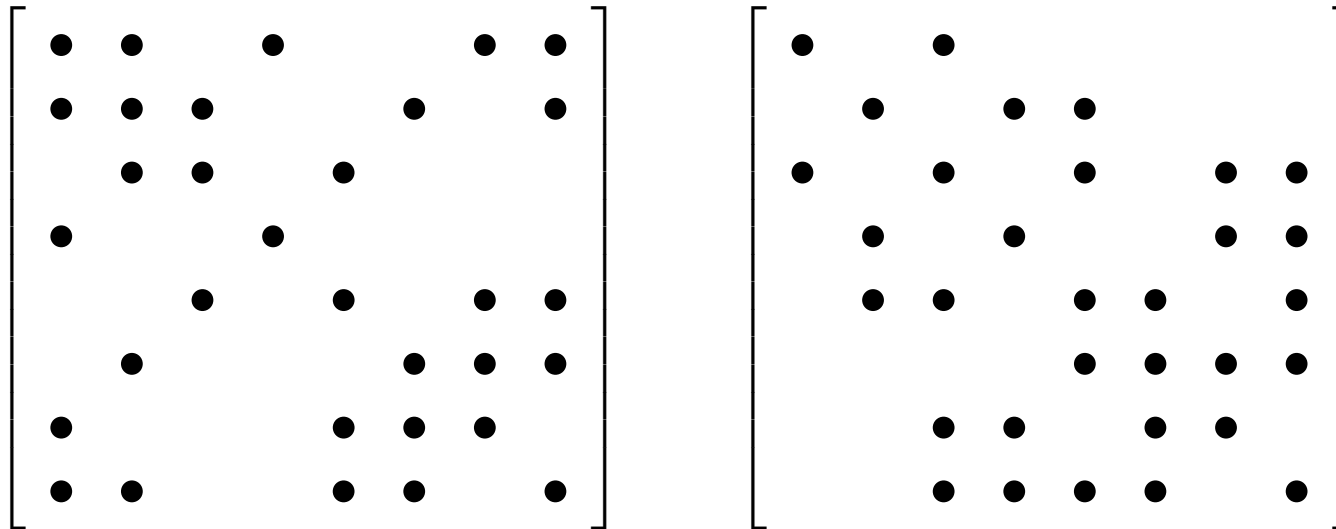
$$(\mathbf{PA} \mathbf{P}^T) (\mathbf{Px}) = \mathbf{Pb} \quad (39b)$$

gdzie  $\mathbf{P}$  jest macierzą permutacji. (Jest to macierz ortogonalna.) Jeśli  $\mathbf{A}$  jest symetryczna i dodatnio określona, także macierz  $\mathbf{PA} \mathbf{P}^T$  jest symetryczna i dodatnio określona, a więc posiada ona swoją faktoryzację Cholesky'ego. Macierz  $\mathbf{P}$  staramy się dobrać tak, aby wypełnienie w czynniku Cholesky'ego spemutowanej macierzy było możliwie małe. Problem

znalezienia permutacji takiej, aby wypełnienie było najmniejsze z możliwych jest NP-zupełny, w praktyce do poszukiwania  $P$  posługujemy się algorytmami heurystycznymi. Z historycznych powodów, z uwagi na związek pomiędzy macierzami symetrycznymi a grafami (struktura zerowych-niezerowych elementów pozadiagonalnych macierzy symetrycznej odpowiada macierzy sąsiedztwa pewnej klasy grafów nieskierowanych), algorytmy te nazywa się *minimum degree algorithms*. Przegląd tych algorytmów wykracza, niestety, poza zakres wykładu ze *wstępu* do metod numerycznych.

Jeżeli znalezienie efektywnej permutacji nie wydaje się tanie i wygodne, można rozważyć użycie zupełnie innej klasy algorytmów, na przykład algorytmów iteracyjnych.

## Przykład



Macierz po prawej stronie stanowi optymalną permutację macierzy po lewej. W obu macierzach 32 elementy (dokładnie połowa) jest pusta. Gdyby zastosować faktoryzację Cholesky'ego do macierzy po lewej, czynnik trójkątny miałby tylko 4 (zamiast 16) elementów zerowych. Czynnik Cholesky'ego macierzy po prawej będzie miał 13 elementów zerowych (trzy elementy się wypełnią).

## Transformacja Householdera

Niech  $\mathbf{u} \in \mathbb{R}^N$ ,  $\mathbf{u} \neq 0$ . Tworzymy macierz

$$\mathbf{P} = \mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2}. \quad (40)$$

W sposób oczywisty  $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$ . Obliczmy

$$\begin{aligned} \mathbf{P}^2 &= \left( \mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} \right) \left( \mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} \right) \\ &= \mathbb{I} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} - 2 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} + 4 \frac{\overbrace{\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{u}\mathbf{u}^T}^{\|\mathbf{u}\|^2}}{\|\mathbf{u}\|^4} \\ &= \mathbb{I} - 4 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} + 4 \frac{\mathbf{u}\mathbf{u}^T}{\|\mathbf{u}\|^2} \\ &= \mathbb{I} \end{aligned} \quad (41)$$

Skoro  $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}$  oraz  $\mathbf{P}^2 = \mathbb{I}$ ,  $\mathbf{P}^T = \mathbf{P}^{-1}$ : macierz (40) jest macierzą symetryczną, rzeczywistą oraz ortogonalną. Macierz taką nazywamy ortogonalną macierzą rzutową.

Niech teraz w (40)

$$\mathbf{u} = \mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1, \quad (42)$$

gdzie  $\hat{\mathbf{e}}_1$  jest pierwszym wektorem jednostkowym. Macierz (40) wraz z (42) nazywam *macierzą Householdera*. Obliczam

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{x} - \frac{2\mathbf{u}\mathbf{u}^T\mathbf{x}}{\|\mathbf{u}\|^2}. \quad (43a)$$

Zauważmy, że  $\mathbf{u}^T\mathbf{x} = \mathbf{x}^T\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1^T\mathbf{x} = \|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1$ , gdzie  $x_1$  jest pierwszą składową wektora  $\mathbf{x}$ .

Analogicznie  $\|\mathbf{u}\|^2 = (\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1)^T (\mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1) = \mathbf{x}^T \mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\| x_1 \mp \|\mathbf{x}\| x_1 + \|\mathbf{x}\|^2 = 2 (\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1)$ . Wobec tego

$$\mathbf{P}\mathbf{x} = \mathbf{x} - \frac{2\mathbf{u} (\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1)}{2 (\|\mathbf{x}\|^2 \mp \|\mathbf{x}\| x_1)} = \mathbf{x} - \mathbf{u} = \pm \|\mathbf{x}\| \hat{\mathbf{e}}_1. \quad (43b)$$

Efektem działania macierzy Householdera na wskazany wektor jest wyzerowanie wszystkich jego składowych, poza pierwszą, i “przelanie” całej jego długości na pierwszą składową. Złożoność obliczeniowa tej procedury wynosi  $O(N)$ .



## Faktoryzacja QR

Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ . Niech  $\mathbf{P}_1$  oznacza transformację Householdera zbudowaną na pierwszej kolumnie macierzy  $\mathbf{A}$ . Otrzymujemy

$$\mathbf{P}_1 \mathbf{A} = \mathbf{A}_1 \quad (44)$$
$$\mathbf{P}_1 \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

Transformacja Householdera  $\mathbf{P}_1$  wyzerowała pierwszą kolumnę macierzy  $\mathbf{A}$ , za wyjątkiem elementu diagonalnego. Złożoność obliczeniowa tego kroku wynosi  $O(N^2)$  (transformacja Householdera działa na  $N$  kolumn).

Niech teraz

$$\mathbf{P}_2 = \left[ \begin{array}{c|cccc} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & & & & \\ 0 & & & & \\ 0 & & & & \\ 0 & & & & \end{array} \right] \quad (45)$$

$(N-1)\mathbf{P}_2$

gdzie  $(N-1)\mathbf{P}_2 \in \mathbb{R}^{(N-1) \times (N-1)}$  jest transformacją Householdera, zbudowaną na drugiej kolumnie macierzy  $\mathbf{A}_1$ , poczynając od elementu diagonalnego w dół. Otrzymujemy

$$\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A} = \mathbf{P}_2\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_2 = \left[ \begin{array}{ccccc} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \dots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \dots \\ & & \bullet & \bullet & \dots \\ & & \bullet & \bullet & \dots \\ & & \vdots & \vdots & \ddots \end{array} \right] \quad (46)$$

Następnie definiuję

$$\mathbf{P}_2 = \left[ \begin{array}{cc|ccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & & & & \\ 0 & 0 & & & & \end{array} \right] \quad (47)$$

$(N-2)\mathbf{P}_3$

gdzie  $(N-2)\mathbf{P}_3 \in \mathbb{R}^{(N-2) \times (N-2)}$  jest transformacją Householdera, zbudowaną na trzeciej kolumnie macierzy  $\mathbf{A}_2$ , poczynając od elementu diagonalnego w dół. Stojąca w lewym górnym rogu macierz jednostkowa służy do tego, żeby nie zepsuć struktury, którą osiągnęliśmy w poprzednich kro-

kach. Otrzymujemy

$$\mathbf{P}_3\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{A} = \mathbf{P}_3\mathbf{A}_2 = \mathbf{A}_3 = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \cdots \\ & & \bullet & \bullet & \cdots \\ & & & \bullet & \cdots \\ & & & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (48)$$

Widać, że po  $N-1$  krokach osiągnę

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \cdots & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \cdots & \bullet \\ & & \bullet & \cdots & \bullet \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & \bullet \end{bmatrix} = \underbrace{\mathbf{P}_{N-1}\mathbf{P}_{N-2}\cdots\mathbf{P}_1}_{\mathbf{Q}^T} \mathbf{A} \quad (49)$$

$\mathbf{R}$  jest macierzą trójkątną górną. Ponieważ macierze  $\mathbf{P}_i$  są ortogonalne, ich iloczyn, oznaczony przez  $\mathbf{Q}^T$  także jest macierzą ortogonalną. Nie

musimy zapamiętywać poszczególnych macierzy  $P_i$ , wystarczy zapamiętać ich iloczyn.

Otrzymaliśmy zatem dla dowolnej macierzy kwadratowej *faktoryzację na macierz ortogonalną i trójkątną górną*:

$$A = QR. \quad (50)$$

Złożoność obliczeniowa faktoryzacji  $QR$  wynosi dla macierzy pełnych  $O(N^3)$ , czyli tyle samo, co faktoryzacji  $LU$ , jednak współczynnik przy wyrazie wiodącym jest gorszy niż dla  $LU$ .  $QR$  nie jest więc metodą “z wyboru” rozwiązywania układów równań liniowych. Jeśli jednak z jakichś względów faktoryzację  $QR$  możemy łatwo (lub musimy) obliczyć, układ równań linio-

wych rozwiązujemy jak następuje:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (51a)$$

$$\mathbf{QRx} = \mathbf{b} \quad (51b)$$

$$\mathbf{Rx} = \mathbf{Q}^T \mathbf{b} \quad (51c)$$

Koszt obliczeniowy przejścia od (51b) do (51c) wynosi  $O(N^2)$ . Równanie (51c) rozwiązujemy metodą *backubstitution*, co także kosztuje  $O(N^2)$ . Jest to więc koszt mały w porównaniu z dokonaniem samej faktoryzacji.

## Obroty Givensa

Transformacja Householdera służy do zerowania wielu składowych jakiegoś wektora. Jeżeli chcemy selektywnie wyzerować jakieś składowe — lub jeśli interesujący nas wektor ma jakąś szczególną postać — bardziej efektywne od transformacji Householdera będą *obroty Givensa*.

Macierz Givensa ma postać (niezaznaczone elementy są zerami)

$$G(i, j) = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & c & & s & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & \ddots \\ & & -s & & c & & \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix} \quad (52)$$

gdzie wyróżnione elementy znajdują się na pozycjach, odpowiednio,  $(i, i)$ ,  $(i, j)$ ,  $(j, i)$ ,  $(j, j)$ . Przyjmujemy, że  $c = \cos \theta$ ,  $s = \sin \theta$ . Macierz (52) jest macierzą obrotu w płaszczyźnie  $(x_i, x_j)$  o kąt  $\theta$  przeciwnie do ruchu wskazówek zegara. Jest to macierz ortogonalna.



Niech  $x$  będzie pewnym wektorem i niech  $y = G(i, j)x$ . Składowe wektora  $y$  wynoszą

$$y_k = \begin{cases} cx_i + sx_j & k = i \\ -sx_i + cx_j & k = j \\ x_k & \text{poza tym} \end{cases} \quad (53)$$

Zażądajmy, aby  $y_j = 0$ . Widać, że musi zachodzić

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \quad s = \frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}. \quad (54)$$

Obrót Givensa (52) wraz z warunkami (54) zeruje  $j$ -tą składową wybranego wektora. Składowa  $i$ -ta przybiera wartość  $\sqrt{x_i^2 + x_j^2}$ .

## Faktoryzacja $QR$ macierzy trójdzielnej symetrycznej

Rozpatrzmy macierz  $A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ , trójdzielną symetryczną

$$A = \begin{bmatrix} a & b & & & \\ b & d & e & & \\ & e & f & g & \\ & & g & h & l \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (55)$$

Zadziałajmy na nią macierzą Givensa taką, aby zerowała drugi element pierwszej kolumny

$$G_1 = \begin{bmatrix} c_1 & s_1 & & & \\ -s_1 & c_1 & & & \\ & & 1 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (56)$$

$$\mathbf{A}_1 = \mathbf{G}_1 \mathbf{A} = \begin{bmatrix} \sqrt{a^2 + b^2} & \frac{ab+bd}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{be}{\sqrt{a^2+b^2}} & & & \\ & \frac{-bd+ad}{\sqrt{a^2+b^2}} & \frac{ae}{\sqrt{a^2+b^2}} & & & \\ & e & f & g & & \\ & & g & h & l & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \end{bmatrix} \quad (57)$$

Wiersze macierzy  $\mathbf{A}_1$  począwszy od trzeciego w dół zgadzają się z wierszami macierzy  $\mathbf{A}$ . Obliczenie macierzy  $\mathbf{A}_1$  wymaga wykonania stałej, *niezależnej od rozmiaru macierzy*, liczby operacji. W wyniku otrzymaliśmy macierz, w której poddiagonalne elementy pierwszej kolumny są zerami.

Macierz  $A_1$  mnożymy przez macierz Givensa

$$G_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & c_2 & s_2 & & \\ & -s_2 & c_2 & & \\ & & & 1 & \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (58)$$

dobraną tak, aby zerowała trzeci element drugiej kolumny macierzy  $A_1$ . Pierwszy wiersz i pierwsza kolumna nie zmieniają się, podobnie jak wiersze począwszy od czwartego. W rezultacie macierz  $A_2 = G_2 A_1 = G_2 G_1 A$  ma zera w poddiagonalnych miejscach dwu pierwszych kolumn. Ten krok także wymaga stałej, niezależnej od rozmiaru macierzy, liczby operacji.

W kolejnym kroku macierz  $A_2$  mnożymy przez taką macierz Givensa, która wyzeruje czwarty element trzeciej kolumny. I tak dalej.

W ten sposób, po  $N-1$  krokach, ponosząc koszt numeryczny  $O(N)$  (stały koszt na krok,  $\sim N$  kroków), otrzymujemy

$$\mathbf{G}_{N-1} \cdots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{A} = \mathbf{R} = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & & & \\ & \bullet & \bullet & \bullet & & \\ & & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & \bullet & \bullet \\ & & & & & \bullet \end{bmatrix}, \quad (59a)$$

czyli

$$\mathbf{A} = \underbrace{\mathbf{G}_1^T \mathbf{G}_2^T \cdots \mathbf{G}_{N-1}^T}_{\mathbf{Q}} \mathbf{R} \quad (59b)$$

Macierz  $\mathbf{Q}$  jest ortogonalna. Macierz  $\mathbf{R}$  jest trójkątna górna (tak naprawdę ma ona tylko dwie niezerowe diagonale nad diagonalą główną). Widzimy, że (59b) jest faktoryzacją  $QR$  macierzy trójdzielnej symetrycznej.

## Zastosowanie do rozwiązywania układu równan liniowych

Jeżeli chcemy użyć obrotów Givensa do rozwiązywania układu równań liniowych

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (60)$$

gdzie  $\mathbf{A}$  jest trójdagonalną macierzą symetryczną, postępując jak poprzednio otrzymujemy kolejno

$$\mathbf{G}_1 \mathbf{Ax} = \mathbf{G}_1 \mathbf{b} \quad (61a)$$

$$\mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{Ax} = \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{b} \quad (61b)$$

$$\dots \quad \dots$$

$$\mathbf{G}_{N-1} \cdots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{Ax} \equiv \mathbf{Rx} = \mathbf{G}_{N-1} \cdots \mathbf{G}_2 \mathbf{G}_1 \mathbf{b}. \quad (61c)$$

Oczywiście istotne jest tylko równanie (61c) — lewych stron poprzednich równań nie musimy wyliczać. Każde kolejne mnożenie po stronie prawej

wykonujemy w stałym czasie, a więc do postaci  $\mathbf{R}\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{b}}$  dochodzimy w czasie  $O(N)$ . To równanie rozwiązujemy metodą *backsubstitution*, co, z uwagi na szczególną postać macierzy  $\mathbf{R}$ , także da się wykonać w czasie liniowym.

Przykład ten pokazuje, że możemy odnieść duży zysk na złożoności obliczeniowej, jeśli tylko dobierzemy odpowiedni algorytm odpowiadający strukturze — w tym wypadku rzadkości i symetryczności — macierzy.

**Uwaga:** Skumulowanej macierzy Givensa  $\mathbf{Q}$  nie musimy wyliczać w sposób jawny — gdybyśmy to chcieli zrobić, wymagałoby to  $O(N^2)$  operacji.

## Singular Value Decomposition

**Twierdzenie 1.** *Dla każdej macierzy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ ,  $M \geq N$ , istnieje rozkład*

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} [\text{diag}(w_i)] \mathbf{V}^T, \quad (62)$$

*gdzie  $\mathbf{U} \in \mathbb{R}^{M \times N}$  jest macierzą kolumnowo ortogonalną,  $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  jest macierzą ortogonalną oraz  $w_i \in \mathbb{R}$ ,  $i = 1, \dots, N$ . Rozkład ten nazywamy rozkładem względem wartości osobliwych (Singular Value Decomposition, SVD). Jeżeli  $M = N$ , macierz  $\mathbf{U}$  jest macierzą ortogonalną.*



## Jądro i zasięg operatora

Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ . *Jądrem operatora  $\mathbf{A}$*  nazywam

$$\text{Ker } \mathbf{A} = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}\} . \quad (63)$$

*Zasięgiem operatora  $\mathbf{A}$*  nazywam

$$\text{Range } \mathbf{A} = \{\mathbf{y} \in \mathbb{R}^M : \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^N : \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{y}\} . \quad (64)$$

Jądro i zasięg operatora są przestrzeniami liniowymi. Jeśli  $M = N < \infty$ ,  
 $\dim(\text{Ker } \mathbf{A}) + \dim(\text{Range } \mathbf{A}) = N$ .

## Sens SVD

Sens SVD najlepiej widać w przypadku, w którym co najmniej jedna z wartości  $w_i = 0$ . Dla ustalenia uwagi przyjmijmy  $w_1 = 0, w_{i \neq 1} \neq 0$ .

Po pierwsze, co to jest  $\mathbf{z} = [z_1, z_2, \dots, z_N]^T = \mathbf{V}^T \mathbf{x}$ ? Ponieważ  $\mathbf{V}$  jest macierzą ortogonalną,  $\mathbf{z}$  jest rozkładem wektora  $\mathbf{x}$  w bazie kolumn macierzy  $\mathbf{V}$ . Korzystając z (62), dostajemy

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{U} [\text{diag}(w_i)] \mathbf{V}^T \mathbf{x} = \mathbf{U} [\text{diag}(0, w_2, \dots, w_N)] \mathbf{z} = \mathbf{U} \begin{bmatrix} 0 \\ w_2 z_2 \\ \vdots \\ w_N z_N \end{bmatrix}. \quad (65)$$

Wynikiem ostatniego mnożenia będzie pewien wektor z przestrzeni  $\mathbb{R}^M$ . Ponieważ pierwszym elementem wektora  $[0, w_2 z_2, \dots, w_N z_N]^T$  jest zero, **wynik ten nie zależy od pierwszej kolumny macierzy  $\mathbf{U}$** . Widzimy zatem, że **kolumny macierzy  $\mathbf{U}$ , odpowiadające niezerowym współczynnikom  $w_i$ , stanowią bazę w zasięgu operatora  $\mathbf{A}$** .

Co by zaś się stało, gdyby  $\mathbf{x}$  był równoległy do wektora stanowiącego pierwszą kolumnę  $\mathbf{V}$ ? Wówczas  $\mathbf{z} = 0$ , a wobec tego  $\mathbf{A}\mathbf{x} = 0$ . Ostatecznie więc widzimy, że **kolumny macierzy  $\mathbf{V}$ , odpowiadające zerowym współczynnikom  $w_i$ , stanowią bazę w jądrze operatora  $\mathbf{A}$** .

## SVD i odwrotność macierzy

Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ . Zauważmy, że  $|\det \mathbf{A}| = \prod_{i=1}^N w_i$ , a zatem  $\det \mathbf{A} = 0$  wtedy i tylko wtedy, gdy co najmniej jeden  $w_i = 0$ . Niech  $\det \mathbf{A} \neq 0$ . Wówczas równanie  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  ma rozwiązanie postaci

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{V} [\text{diag}(w_i^{-1})] \mathbf{U}^T \mathbf{b}. \quad (66)$$

Niech teraz  $\det \mathbf{A} = 0$ . Równanie  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  *także* ma rozwiązanie, o ile tylko  $\mathbf{b} \in \text{Range } \mathbf{A}$ . Rozwiązanie to ma postać  $\mathbf{x} = \tilde{\mathbf{A}}^{-1}\mathbf{b}$ , gdzie

$$\tilde{\mathbf{A}}^{-1} = \mathbf{V} [\text{diag}(\tilde{w}_i^{-1})] \mathbf{U}^T. \quad (67a)$$

gdzie

$$\tilde{w}_i^{-1} = \begin{cases} w_i^{-1} & \text{gdy } w_i \neq 0, \\ 0 & \text{gdy } w_i = 0. \end{cases} \quad (67b)$$

## SVD i macierze osobliwe

Wróćmy jeszcze raz do problemu osobliwych (z zerowym wyznacznikiem głównym) układów równań, wspomnianego już na stronie 59. Jeżeli  $\det A = 0$ , układ równań z całą pewnością nie ma *jednoznacznego* rozwiązania. Może jednak mieć rozwiązanie (a nawet nieskończenie wiele rozwiązań), jeżeli prawa strona *należy do zasięgu A*. Jest to równoważne warunkowi, że wszystkie wyznaczniki poboczne we wzorach Cramera zerują się. Wówczas **rozwiązaniem** układu równań jest każdy wektor postaci

$$\mathbf{x} = \tilde{A}^{-1}\mathbf{b} + \mathbf{x}_0, \quad (68)$$

gdzie  $\tilde{A}^{-1}$  jest pseudoodwrotnością daną przez (67), zaś  $\mathbf{x}_0 \in \text{Ker}A$  jest dowolnym wektorem należącym do jądra. Rozwiązanie z  $\mathbf{x}_0 = 0$  ma spośród nich najmniejszą normę. Zauważmy, że na wektory należące do zasięgu, pseudoodwrotność działa jak zwykła odwrotność macierzy.

Jeżeli  $b$  *nie* należy do zasięgu, wyrażenie (68) z  $x_0 = 0$  daje rozwiązanie przybliżone i najlepsze w sensie najmniejszych kwadratów, co niekiedy jest bardzo użyteczne.

## SVD i współczynnik uwarunkowania

**Twierdzenie 2.** Jeżeli macierz  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  posiada rozkład (62) oraz  $\det \mathbf{A} \neq 0$ , jej współczynnik uwarunkowania spełnia

$$\kappa = \frac{\max_i |w_i|}{\min_i |w_i|}. \quad (69)$$

Jeśli macierz jest źle uwarunkowana, ale *formalnie* odwracalna, numeryczne rozwiązanie równania  $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$  może być zdominowane przez wzmożony błąd zaokrąglenia. Aby tego uniknąć, często zamiast (bezużytecznego!) rozwiązania dokładnego (66), używa się *przybliżonego* (i użytecznego!) rozwiązania w postaci (67) z następującą modyfikacją

$$\tilde{w}_i^{-1} = \begin{cases} w_i^{-1} & \text{gdy } |w_i| > \tau, \\ 0 & \text{gdy } |w_i| \leq \tau, \end{cases} \quad (70)$$

gdzie  $\tau$  jest pewną zadaną tolerancją.

## Nadokreślone układy równań

Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{M \times N}$ ,  $M > N$ ,  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^M$ ,  $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N$ . Wówczas układ równań

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \quad (71)$$

ma więcej równań, niż niewiadomych. Układ taki, zwany nadokreślonym, w ogólności nie ma rozwiązań. Za pomocą SVD można jednak znaleźć jego rozwiązanie przybliżone. Mianowicie

$$\|\mathbf{A} (\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{b}) - \mathbf{b}\|_2 = \text{minimum}, \quad (72)$$

gdzie  $\tilde{\mathbf{A}}^{-1}$  jest pseudoodwrotnością (67). Widzimy, że  $\tilde{\mathbf{A}}^{-1} \mathbf{b}$  jest przybliżonym, najlepszym w sensie najmniejszych kwadratów rozwiązaniem układu (71). Metoda ta jest *powszechnie* używana w liniowym zagadnieniu najmniejszych kwadratów.

## Wzór Shermana-Morrisona

**Twierdzenie:** Niech  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ,  $\det \mathbf{A} \neq 0$  oraz  $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^N$ . Niech  $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T$ . Wówczas

$$\mathbf{A}_1^{-1} = \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}. \quad (73)$$

Zauważmy, że ponieważ  $\det \mathbf{A} \neq 0$ , macierz  $\mathbf{A}^{-1}$  istnieje. Ponadto wyrażenie  $\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}$  jest *liczbą* (skalarem).



## Przykład

Niech  $\mathbf{u} = \mathbf{v} = [1, 0, 0, 0, 1]^T$ . Wówczas

$$\mathbf{uv}^T = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1] = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (74)$$

Niech teraz

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_1 = \mathbf{A} + \mathbf{uv}^T = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 4 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}. \quad (75)$$

*Dowód.*

$$\begin{aligned}
& (\mathbf{A} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T) \left( \mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \right) \\
&= \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{A}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} \\
&\quad - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{u} \underbrace{\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}_{\text{to jest liczba!}} \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} \\
&= \mathbb{I} - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} + \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} - \frac{\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} \\
&= \mathbb{I} + \left( 1 - \frac{1}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} - \frac{\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}}{1 + \mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1}\mathbf{u}} \right) \mathbf{u}\mathbf{v}^T\mathbf{A}^{-1} = \mathbb{I}. \quad (76)
\end{aligned}$$

□

## Algorytm Shermana-Morrisona

Wzór Shermana-Morrisona (73) pozwala zkonstruować odwrotność macierzy  $A_1$  jeśli znamy odwrotność  $A$ . Jednak w praktyce prawie **nigdy nie konstruujemy jawnej odwrotności macierzy!** Jak więc zastosować ten wzór?

Zauważmy, że **zapewne** chcemy obliczyć jakieś  $A_1^{-1}b$ , gdzie  $b$  jest znanym wektorem, przy założeniu, że **łatwo** potrafimy obliczyć  $A^{-1}b$ . Interesuje nas znalezienie

$$w = A_1^{-1}b = \left( A^{-1} - \frac{A^{-1}uv^T A^{-1}}{1 + v^T A^{-1}u} \right) b \quad (77)$$

Algorytm wygląda następująco:

(a) Rozwiąż równanie

$$\mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{b} \quad (78a)$$

(b) Rozwiąż równanie

$$\mathbf{A}\mathbf{q} = \mathbf{u} \quad (78b)$$

(c) Oblicz

$$\mathbf{w} = \mathbf{z} - \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{z}}{1 + \mathbf{v}^T \mathbf{q}} \mathbf{q}. \quad (78c)$$

Problem sprowadza się więc do rozwiązywania dwu równań (78a),(78b) z taką samą macierzą, które umiemy szybko rozwiązać, gdyż — na przykład — znamy faktoryzację macierzy  $\mathbf{A}$ . Zauważmy, że  $\mathbf{v}^T \mathbf{A}^{-1} \mathbf{b} = \mathbf{v}^T \mathbf{z}$  jest *liczbą*.

### Przykład (c.d.)

Pierwsza z macierzy (75) jest macierzą symetryczną, dodatnio określoną i trójdziagonalną, a więc jej czynnik Cholesky'ego ma tylko dwie niezerowe diagonale, a koszt jego wyliczenia jest rzędu  $O(N)$ . Czynnik Cholesky'ego drugiej z tych macierzy jest pełną macierzą trójkątną (nastąpi *wypełnienie*) i koszt jego wyliczenia jest rzędu  $O(N^3)$  (wyobraźmy sobie, że zamiast o macierzach  $5 \times 5$ , mówimy o macierzach  $1000 \times 1000$ ). Zastosowanie algorytmu (78) redukuje problem do znalezienia i dwukrotnego zastosowania rzadkiego czynnika Cholesky'ego pierwszej z macierzy (75). Da się to zrobić w czasie liniowym.