Zad. 5. Rozkład LU macierzy kwadratowej z częściowym wyborem elementu głównego

e-mail: andrzej.kedziorski@fizyka.umk.pl
tel.: 56611-3274
pokój: 485
http://www.fizyka.umk.pl/~tecumseh/EDU/MNII/

Zadanie 5

Napisz program dokonujacy rozkładu LU macierzy kwadratowej **A** za pomoca schematów zwartych Doolittle'a lub Crouta. Program pobiera z wejścia wymiar macierzy i macierz **A**. Zmodyfikuj program dokonujący rozkładu LU macierzy metodą Doolittle'a (albo Crouta) włączając częściowy wybór elementu głównego.

Rozkład LU

- $\mathbf{A}$ - nieosobliwa macierz kwadratowa $n \times n$ o elementach rzeczywistych
- $\det \mathbf{A}_k \neq 0$, gdzie $\mathbf{A}_k$ - macierz $k \times k$ utworzona z k początkowych wierszy i kolumn macierzy $\mathbf{A}$
- Rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, gdzie $\mathbf{L}$ - macierz trójkątna dolna $n \times n$, $\mathbf{U}$ - macierz trójkątna górna $n \times n$, tzn.

$$(\mathbf{L})_{ij} = \begin{cases} 0 & i < j \\ \ell_{ij} & i \geqslant j \end{cases} \qquad (\mathbf{U})_{ij} = \begin{cases} u_{ij} & i \leqslant j \\ 0 & i > j \end{cases}$$

- Mamy n^2 równań na elementy macierzy $\mathbf{A}$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} (\mathbf{L})_{ik} (\mathbf{U})_{kj} = \sum_{k=1}^{r} \ell_{ik} u_{kj},$$

  gdzie $r = \min(i, j)$
- Jeżeli $\ell_{ii} = 1$ albo $u_{ii} = 1$ dla $i = 1, ..., n$, to mamy w sumie do wyznaczenia n^2 elementów macierzy $\mathbf{L}$ i $\mathbf{U}$

Schematy zwarte - metoda Doolittle'a

- Zakładamy, że $\ell_{ii} = 1$ dla $i = 1, \dots, n$
- Wykonujemy $k = 1, \dots, n$ kroków; w k-tym kroku
  1. Wyznaczamy k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$ ($j \geqslant k$)

$$a_{kj} = \sum_{p=1}^{k} \ell_{kp} u_{pj} \quad \Rightarrow \quad u_{kj} = a_{kj} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{kp} u_{pj} \quad j = k, k+1, \dots, n$$

  2. Wyznaczamy k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$ ($i > k$)

$$a_{ik} = \sum_{p=1}^{k} \ell_{ip} u_{pk} \quad \Rightarrow \quad \ell_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{ip} u_{pk} \right) / u_{kk} \quad i = k+1, \dots, n$$

- W pierwszym kroku znamy $\ell_{11} = 1$, co pozwala najpierw wyznaczyć pierwszy wiersz macierzy $\mathbf{U}$, a to z kolei pozwala wyznaczyć pierwszą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$
- W k-tym kroku znamy $\ell_{kk} = 1$, $k-1$ początkowych wierszy macierzy $\mathbf{U}$ i $k-1$ początkowych kolumn macierzy $\mathbf{L}$, to pozwala najpierw wyznaczyć k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$, a to z kolei pozwala wyznaczyć k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$

Schematy zwarte - metoda Crouta

- Zakładamy, że $u_{ii} = 1$ dla $i = 1, \dots, n$
- Wykonujemy $k = 1, \dots, n$ kroków; w k-tym kroku
  1. Wyznaczamy k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$ ($i \geqslant k$)

$$a_{ik} = \sum_{p=1}^{k} \ell_{ip} u_{pk} \quad \Rightarrow \quad \ell_{ik} = a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{ip} u_{pk} \quad i = k, k+1, \dots, n$$

  2. Wyznaczamy k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$ ($j > k$)

$$a_{kj} = \sum_{p=1}^{k} \ell_{kp} u_{pj} \quad \Rightarrow \quad u_{kj} = \left(a_{kj} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{kp} u_{pj} \right) / \ell_{kk} \quad j = k+1, \dots, n$$

- W pierwszym kroku znamy $u_{11} = 1$, co pozwala najpierw wyznaczyć pierwszą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$, a to z kolei pozwala wyznaczyć pierwszy wiersz macierzy $\mathbf{U}$
- W k-tym kroku znamy $\ell_{kk} = 1$, $k-1$ początkowych wierszy macierzy $\mathbf{U}$ i $k-1$ początkowych kolumn macierzy $\mathbf{L}$, to pozwala najpierw wyznaczyć k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$, a to z kolei pozwala wyznaczyć k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$

Do zrobienia

1. Wczytać z wejścia wymiar n macierzy $\mathbf{A}$ i elementy tej macierzy
2. Dokonać rozkładu LU macierzy $\mathbf{A}$ metodą Doolittle'a albo Crouta
3. Wypisać na wyjściu macierze trójkątne $\mathbf{L}$ i $\mathbf{U}$
4. Sprawdzić, czy $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$
5. Porównać wyniki programu z wynikami z gotowych procedur (np. „lu" Matlaba)

Częściowy wybór elementu głównego - motywacje

- Dokonać rozkładu LU macierzy

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & -2 & 2 \\ 3 & 3 & -3 \end{pmatrix}$$

- Zamieniamy wiersze w macierzy $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A}' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 3 & 3 & -3 \\ 2 & -2 & 2 \end{pmatrix}$$

  Dokonać rozkładu LU tej macierzy

- Czy w obydwu przypadkach udało się dokonać rozkładu LU?

Częściowy wybór elementu głównego - metoda Doolittle'a

- k-ty krok metody Doolittle'a
  1. Wyznaczamy k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$ ($j \geqslant k$)

$$u_{kj} = a_{kj} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{kp} u_{pj} \quad j = k, k+1, \ldots, n$$

  2. Wyznaczamy k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$ ($i > k$)

$$\ell_{ik} = \left(a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{ip} u_{pk} \right) / u_{kk} \quad i = k+1, \ldots, n$$

- Problemy: $u_{kk} = 0$ lub $|u_{kk}| \sim 0$ (np. „śmieci numeryczne")
- Wybór elementu głównego:
  1 wyznaczamy k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$
  1a przed wyznaczeniem k-tej kolumny macierzy $\mathbf{L}$ szukamy w k-tym wierszu macierzy $\mathbf{U}$ elementu o maksymalnej wartości bezwzględnej, tzn.

$$\max_{j=k,\ldots,n} |u_{kj}| \Rightarrow u_{kj_{\max}}$$

  1b zamieniamy w macierzy $\mathbf{U}$ kolumny k i $j_{\max}$
  2 wyznaczamy k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$

Częściowy wybór elementu głównego - metoda Doolittle'a

- Uzyskujemy rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}'$, gdzie $\mathbf{U}'$ jest macierzą trójkątną górną, w której poprzestawialiśmy kolumny
- Macierz $\mathbf{U}'$ można przedstawić jako $\mathbf{U}' = \mathbf{U}\mathbf{P}$, gdzie $\mathbf{U}$ jest macierzą trójkątną górną, a $\mathbf{P}$ jest macierzą permutacji
- Rozkład macierzy $\mathbf{A}$ przyjmuje wtedy następującą postać

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}\mathbf{P}$$

- Pojedynczą zamianę kolumn i i j w macierzy $\mathbf{U}$ można przedstawić jako iloczyn macierzy $\mathbf{U}\mathbf{P}^{ij}$, gdzie macierz $\mathbf{P}^{ij}$ jest macierzą jednostkową $n \times n$, w której zamieniono wiersze i z j
- W każdym kroku metody Doolittle'a dokonujemy (co najwyżej) pojedynczej zamiany kolumn w macierzy $\mathbf{U}$, dlatego końcowy wynik, czyli macierz $\mathbf{U}'$, możemy przedstawić w następujący sposób

$$\mathbf{U}' = \mathbf{U}\mathbf{P} = \mathbf{U}\mathbf{P}_1\mathbf{P}_2 \ldots \mathbf{P}_k \ldots \mathbf{P}_{n-1}\mathbf{P}_n,$$

gdzie $\mathbf{P}_k$ jest macierzą pojedynczej zamiany kolumn wykonanej w k-tym kroku metody Doolittle'a

Częściowy wybór elementu głównego - metoda Crouta

- k-ty krok metody Crouta
  1. Wyznaczamy k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$ ($i > k$)

$$\ell_{ik} = a_{ik} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{ip} u_{pk} \quad i = k+1, \ldots, n$$

  2. Wyznaczamy k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$ ($j \geqslant k$)

$$u_{kj} = \left(a_{kj} - \sum_{p=1}^{k-1} \ell_{kp} u_{pj} \right) / \ell_{kk} \quad j = k, k+1, \ldots, n$$

- Problemy: $\ell_{kk} = 0$ lub $|\ell_{kk}| \sim 0$ (np. „śmieci numeryczne")
- Wybór elementu głównego:
  1 wyznaczamy k-tą kolumnę macierzy $\mathbf{L}$
  1a przed wyznaczeniem k-tego wiersza macierzy $\mathbf{U}$ szukamy w k-tej kolumnie macierzy $\mathbf{L}$ elementu o maksymalnej wartości bezwzględnej, tzn.

$$\max_{i=k,\ldots,n} |\ell_{ik}| \Rightarrow \ell_{i_{\max} k}$$

  1b zamieniamy w macierzy $\mathbf{L}$ wiersze k i $i_{\max}$
  2 wyznaczamy k-ty wiersz macierzy $\mathbf{U}$

Częściowy wybór elementu głównego - metoda Crouta

- Uzyskujemy rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{L}'\mathbf{U}$, gdzie $\mathbf{L}'$ jest macierzą trójkątną dolną, w której poprzestawialiśmy wiersze
- Macierz $\mathbf{L}'$ można przedstawić jako $\mathbf{L}' = \mathbf{PL}$, gdzie $\mathbf{L}$ jest macierzą trójkątną dolną, a $\mathbf{P}$ jest macierzą permutacji
- Rozkład macierzy $\mathbf{A}$ przyjmuje wtedy następującą postać

$$\mathbf{A} = \mathbf{PLU}$$

- Pojedynczą zamianę wierszy i i j w macierzy $\mathbf{L}$ można przedstawić jako iloczyn macierzy $\mathbf{P}^{ij}\mathbf{L}$, gdzie macierz $\mathbf{P}^{ij}$ jest macierzą jednostkową $n \times n$, w której zamieniono kolumny i z j
- W każdym kroku metody Crouta dokonujemy (co najwyżej) pojedynczej zamiany wierszy w macierzy $\mathbf{L}$, dlatego końcowy wynik, czyli macierz $\mathbf{L}'$, możemy przedstawić w następujący sposób

$$\mathbf{L}' = \mathbf{PL} = \mathbf{P}_n\mathbf{P}_{n-1}...\mathbf{P}_k...\mathbf{P}_2\mathbf{P}_1\mathbf{L},$$

gdzie $\mathbf{P}_k$ jest macierzą pojedynczej zamiany wierszy wykonanej w k-tym kroku metody Crouta

Do zrobienia - modyfikacja programu na rozkład LU macierzy

1. Wczytać z wejścia wymiar n macierzy $\mathbf{A}$ i elementy tej macierzy
2. Dokonać rozkładu LU macierzy $\mathbf{A}$ metodą Doolittle'a (albo Crouta) z częściowym wyborem elementu głównego
3. Wypisać na wyjściu macierze trójkątne $\mathbf{L}$, $\mathbf{U}$ oraz macierz permutacji $\mathbf{P}$
4. Sprawdzić, czy $\mathbf{A} = \mathbf{LUP}$ (albo $\mathbf{A} = \mathbf{PLU}$)
5. Porównać wyniki programu z wynikami z gotowych procedur (np. „lu" Matlaba)