LU-Dekomposition und der Crout-Algorithmus

Generelle Vorgehensweise

Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Ausgangspunkt: Lineares Gleichungssystem:

$$\mathbf{A}\vec{x} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \vec{b}$$

Zerlegung der Koeffizientenmatrix in untere (L) und obere (U) Dreiecksmatrix (LU-Dekomposition)

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$$

Schrittweise Lösung der zwei neuen Gleichungssysteme $\mathbf{L}\vec{y} = \vec{b}$ und $\mathbf{U}\vec{x} = \vec{y}$ durch Vorwärts- bzw. Rückwärtselimination

$$\mathbf{A}\vec{x} = \mathbf{LU}\vec{x} = \mathbf{L}\underbrace{(\mathbf{U}\vec{x})}_{=\vec{y}} = \mathbf{L}\vec{y} = \vec{b}$$

Vorwärts- und Rückwärtselimination

$$\mathbf{A}\vec{x} = \mathbf{LU}\vec{x} = \mathbf{L}(\mathbf{U}\vec{x}) = \mathbf{L}\vec{y} = \vec{b}$$

Lösung von $\mathbf{L}\vec{y} = \vec{b}$ durch Vorwärtselimination

$$\mathbf{L}\vec{y} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} = \vec{b}$$

$$y_1 = b_1$$
$$y_2 = b_2 - l_{21} y_1$$
$$y_3 = b_3 - l_{31} y_1 - l_{32} y_2$$

Allgemein:

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j \quad \text{für } i = 1, \ldots, n$$

Hinweis: $y_1 = b_1$ (trivialer Fall)

Lösung von $\mathbf{U}\vec{x} = \vec{y}$ durch Rückwärtselimination

$$\mathbf{U}\vec{x} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \vec{\mathbf{y}}$$

$$x_3 = \frac{y_3}{u_{33}} \qquad x_2 = \frac{1}{u_{22}}(y_2 - u_{23} x_3)$$

$$x_1 = \frac{1}{u_{11}}(y_1 - u_{12} x_2 - u_{13} x_3)$$

Allgemein:

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}}\left(y_i - \sum_{j=1+i}^{n} u_{ij} x_j\right) \quad \text{für } i = n, \ldots, 1$$

Hinweis: $x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}$ (trivialer Fall)

Crout-Algorithmus zur LU-Dekomposition

Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$\mathbf{I}$: Einheitsmatrix

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{M}_1\,\mathbf{A}$$

$$\mathbf{M_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ -\frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{M_1} = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{A} = \overbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \overbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 1 \end{pmatrix}}^{\mathbf{M}_1^{-1}} \overbrace{\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & \left(-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}\right) + a_{22} & \left(-\frac{a_{21}}{a_{11}}a_{13}\right) + a_{23} \\ 0 & \left(-\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{12}\right) + a_{32} & \left(-\frac{a_{31}}{a_{11}}a_{13}\right) + a_{33} \end{pmatrix}}^{\mathbf{M_1}\,\mathbf{A}}$$

$$\mathbf{A} = \overbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l'_{21} & 1 & 0 \\ l'_{31} & 0 & 1 \end{pmatrix}}^{\mathbf{L}'} \overbrace{\begin{pmatrix} u'_{11} & u'_{12} & u'_{13} \\ 0 & u'_{22} & u'_{23} \\ 0 & u'_{32} & u'_{33} \end{pmatrix}}^{\mathbf{U}'}$$

$\mathbf{U}'$ ist (noch) keine untere Dreiecksmatrix!

Crout-Algorithmus zur LU-Dekomposition

Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

$$\mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{M}_2 = \mathbf{I}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}'\mathbf{M}_2^{-1}\mathbf{M}_2\mathbf{U}'$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\dfrac{u'_{32}}{u'_{22}} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{M}_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \dfrac{u'_{32}}{u'_{22}} & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \underbrace{\overbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l'_{21} & 1 & 0 \\ l'_{31} & \dfrac{u'_{32}}{u'_{22}} & 1 \end{pmatrix}}^{\mathbf{L}'\mathbf{M}_2^{-1}}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\overbrace{\begin{pmatrix} u'_{11} & u'_{12} & u'_{13} \\ 0 & u'_{22} & u'_{23} \\ 0 & 0 & \left(-\dfrac{u'_{32}}{u'_{22}}u'_{23}\right) + u'_{33} \end{pmatrix}}^{\mathbf{M}_2\mathbf{U}'}}_{\mathbf{U}}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \overset{2}{\boxed{l_{21}}} & 1 & 0 \\ \overset{5}{\boxed{l_{31}}} & \underset{6}{\boxed{l_{32}}} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \overset{1}{\boxed{u_{11} \quad u_{12} \quad u_{13}}} & & \\ 0 & \overset{3}{\boxed{u_{22}}} & \boxed{u_{23}}^{4} \\ 0 & 0 & \boxed{u_{33}}^{7} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \overset{1}{\boxed{u_{11} \qquad u_{12} \qquad u_{13}}} & & \\ \overset{2}{\boxed{l_{21}}}u_{11} & l_{21}u_{12} + \boxed{u_{22}}\;3 & l_{21}u_{13} + \boxed{u_{23}}\;4 \\ \overset{5}{\boxed{l_{31}}}u_{11} & l_{31}\,u_{12} + \underset{6}{\boxed{l_{32}}}u_{22} & l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + \underset{7}{\boxed{u_{33}}} \end{pmatrix}$$

Crout-Algorithmus zur LU-Dekomposition

Allgemein:

1. Setze $l_{ii} = 1$ für $i = 1, \ldots, n$
2. Berechne **L** und **U** für $j = 1, \ldots, n$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \qquad \text{für } i = 1, \ldots, j$$

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right) \qquad \text{für } i = j+1, j+2, \ldots, n$$

Achtung: vor einem Wechsel zum nächsthöheren j sind beide Prozeduren zu durchlaufen

Pseudo-Code

L=Einheitsmatrix
U=Ausgangsmatrix A

für alle Spalten j=1 bis n
    für jede Zeile von i=j+1 bis n
        $l_{ij} = \mathrm{u_{ij}}/\mathrm{u_{jj}}$
        $u_{ij} = 0$
        für alle Spalten von k=j+1 bis n
            $u_{ik} = u_{ik} - l_{ij} u_{jk}$
        end
    end
end

Überblick

Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Crout-Algorithmus

L=Einheitsmatrix
U=Ausgangsmatrix A

für alle Spalten j=1 bis n
    für jede Zeile von i=j+1 bis n
        $l_{ij} = \mathrm{u}_{\mathrm{ij}}/\mathrm{u}_{\mathrm{jj}}$
        $u_{ij} = 0$
        für alle Spalten von k=j+1 bis n
            $u_{ik} = u_{ik} - l_{ij}u_{jk}$
        end
    end
end

Vorwärtselimination

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}y_j \quad \text{für } i = 1, \dots, n$$

Hinweis: $y_1 = b_1$ (trivialer Fall)

Rückwärtselimination

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}}\left(y_i - \sum_{j=1+i}^{n} u_{ij}x_j\right) \quad \text{für } i = n, \dots, 1$$

Hinweis: $x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}$ (trivialer Fall)

Weiterführender Hinweis: Pivotisierung

Institute of Applied Physics
Friedrich-Schiller-Universität Jena

Beispiel für “problematische” Koeffizientenmatrix A:

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

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{a_{21}}{\boldsymbol{a_{11}}} & 1 & 0 \\ \frac{a_{31}}{\boldsymbol{a_{11}}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{a_{11}} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & \left(-\frac{a_{21}}{\boldsymbol{a_{11}}} a_{12}\right) + a_{22} & \left(-\frac{a_{21}}{\boldsymbol{a_{11}}} a_{13}\right) + a_{23} \\ 0 & \left(-\frac{a_{31}}{\boldsymbol{a_{11}}} a_{12}\right) + a_{32} & \left(-\frac{a_{31}}{\boldsymbol{a_{11}}} a_{13}\right) + a_{33} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \infty & 1 & 0 \\ \infty & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & 2 & 1 \\ 0 & -\infty & -\infty \\ 0 & -\infty & -\infty \end{pmatrix}$$

Um dieses Problem zu umgehen und numerische Fehler zu minimieren, wird eine geeignete Permutation der Zeilen durchgeführt: $\mathbf{PA}\vec{x} = \mathbf{P}\vec{b}$. Dieser Prozess wird als Pivotisierung bezeichnet. (In der Seminaraufgabe muss keine Pivotisierung implementiert werden!)