

Numerikus módszerek 1.

4. előadás: Megmaradási tételek, progonka módszer, LDU -felbontás,
Cholesky-felbontás

Krebsz Anna

ELTE IK

- 1 Megmaradási tételek
- 2 Rövidített GE (progonka módszer)
- 3 LDU -felbontás
- 4 Cholesky-felbontás

- 1 Megmaradási tételek
- 2 Rövidített GE (progonka módszer)
- 3 LDU -felbontás
- 4 Cholesky-felbontás

Definíció: szimmetrikus mátrixok

Az A mátrix szimmetrikus, ha $A = A^T$.

Definíció: pozitív definit mátrixok

Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ szimmetrikus mátrix *pozitív definit*, ha

- 1 $\langle Ax, x \rangle = x^T Ax > 0$ bármely $0 \neq x \in \mathbb{R}^n$ esetén; vagy
- 2 minden főminorára $D_k = \det(A_k) > 0$; vagy
- 3 minden sajátértéke pozitív.

Állítás: pozitív definit mátrixok ekvivalens jellemzése

Az előző **1. 2. 3.** feltételek ekvivalensek.

Biz.: nélkül.



Definíció:

Az A mátrix **szigorúan diagonálisan domináns a soraira**, ha $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i} |a_{ij}| \quad (i = 1, \dots, n)$.

Definíció:

Az A mátrix **szigorúan diagonálisan domináns az oszlopaira**, ha $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i} |a_{ji}| \quad (i = 1, \dots, n)$.

Példa:

A következő mátrix szigorúan diagonálisan domináns a soraira és oszlopaira is.

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & -2 \\ -2 & 5 & 1 \\ 0 & -3 & 4 \end{bmatrix}$$

Definíció:

Az A mátrix **fél sávszélessége** $s \in \mathbb{N}$, ha

$$\forall i, j : |i - j| > s : a_{ij} = 0 \text{ és}$$

$$\exists k, l : |k - l| = s : a_{kl} \neq 0.$$

Példa:

A következő mátrix szimmetrikus, pozitív definit és fél sávszélessége 1.

$$\begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 4 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

Definíció:

Az A mátrix **profilja** sorokra a (k_1, \dots, k_n) , oszlopokra az (l_1, \dots, l_n) szám n -sek, melyekre

$$\forall j = 1, \dots, k_i : a_{ij} = 0 \text{ és } a_{i, k_i+1} \neq 0,$$

$$\forall i = 1, \dots, l_j : a_{ij} = 0 \text{ és } a_{l_j+1, j} \neq 0.$$

Soronként és oszloponként az első nem nulla elemig a nullák száma.

Példa:

A mátrix profilja sorokra $(0, 0, 2, 1)$, oszlopokra $(0, 1, 1, 2)$.

$$\begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 3 \\ 0 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

Készítsük el az $Ax = b$ LER k . sor utáni particionálását ($k < n$, $k \in \mathbb{N}$) és tegyük fel, hogy $A_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ invertálható.

$$\left[\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} b_1 \\ b_2 \end{array} \right]$$

Particionált alakban a LER:

$$A_{11}x_1 + A_{12}x_2 = b_1$$

$$A_{21}x_1 + A_{22}x_2 = b_2$$

Végezzünk el egy blokkos GE-s lépést:

2. egyenlet $- (A_{21} \cdot A_{11}^{-1})$ 1. egyenlet

$$\underbrace{(A_{21} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{11})}_0 x_1 + (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}) x_2 = b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1$$

A GE blokkos lépése után a 2. sor alakja:

$$(A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})x_2 = b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1.$$

Particionálva a LER:

$$\left[\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline 0 & A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} \end{array} \right] \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 - A_{21}A_{11}^{-1}b_1 \end{bmatrix}$$

- Most már csak az $(n - k) \times (n - k)$ -s jobb alsó mátrix részen kell folytatnunk a GE-t.
- $k = 1$ esetén $A_{11} = (a_{11})$. Feltéve, hogy $a_{11} \neq 0$, akkor a fenti lépés a (blokk nélküli) 1. GE-s lépést írja le.

Definíció: Schur-komplementer

Tegyük fel, hogy $A_{11} \in \mathbb{R}^{k \times k}$ invertálható mátrix. Az A mátrix A_{11} -re **vonatkozó Schur-komplementere** az

$$[A|A_{11}] := A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}$$

$(n - k) \times (n - k)$ -s mátrix.

A Schur komplementer azt mutatja, hogy az A_{11} -gyel végzett GE után mely mátrixon kell folytatni az eliminációt. Az új fogalom segítségével könnyebben fogalmazhatjuk meg, hogy a GE mely tulajdonságokat örökíti tovább.

Tétel: megmaradási tételek a GE-ra

A GE során a következő tulajdonságok öröklődnek A -ról a Schur-komplementerre:

- 1 $\det(A) \neq 0 \Rightarrow \det([A|A_{11}]) \neq 0$
- 2 A szimmetrikus $\Rightarrow [A|A_{11}]$ szimmetrikus
- 3 A pozitív definit $\Rightarrow [A|A_{11}]$ pozitív definit
- 4 A szig. diag. dom. $\Rightarrow [A|A_{11}]$ szig. diag. dom.
- 5 $[A|A_{11}]$ fél sáv szélessége $\leq A$ fél sáv szélessége
- 6 A GE során a profilnál a soronkénti és oszloponkénti nullák az első nem nulla elemig megmaradnak.

Gondoljuk végig az LU-felbontás L, U mátrixára a megfelelő tulajdonságokat.

Biz.: 1.) Determináns:

Mivel a GE determináns tartó, így $\det(A) = \det(A^{(1)}) \neq 0$.

$$A^{(1)} = \left[\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline 0 & [A|A_{11}] \end{array} \right]$$

$$0 \neq \det(A^{(1)}) = \underbrace{\det(A_{11})}_{\neq 0} \cdot \det([A|A_{11}]) \Leftrightarrow \det([A|A_{11}]) \neq 0$$



2.) Szimmetria:

Ha A szimmetrikus, akkor A_{11} és A_{22} is az, továbbá $A_{21}^\top = A_{12}$.

$$\begin{aligned} [A|A_{11}]^\top &= (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^\top = A_{22}^\top - A_{12}^\top(A_{11}^{-1})^\top A_{21}^\top = \\ &= A_{22}^\top - A_{12}^\top(A_{11}^\top)^{-1}A_{21}^\top = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} = [A|A_{11}] \end{aligned}$$



Biz.: 3.) Pozitív definitiség:

Tudjuk, hogy $\langle Ax, x \rangle > 0$ minden $x \neq 0$ vektorra.

Be kell látnunk, hogy $\langle [A|A_{11}]x_2, x_2 \rangle > 0$ minden $x_2 \neq 0$ vektorra.

Vegyük észre, hogy $x \in \mathbb{R}^n$ és $x_2 \in \mathbb{R}^{n-k}$.

$$Ax = \left[\begin{array}{c|c} A_{11} & A_{12} \\ \hline A_{21} & A_{22} \end{array} \right] \cdot \left[\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} A_{11}x_1 + A_{12}x_2 \\ A_{21}x_1 + A_{22}x_2 \end{array} \right]$$

Legyen $x_2 \in \mathbb{R}^{n-k}$ tetszőleges, válasszuk meg $x_1 \in \mathbb{R}^k$ vektort úgy, hogy Ax első k komponense 0 legyen:

$$A_{11}x_1 + A_{12}x_2 = 0 \quad \Rightarrow \quad x_1 := -A_{11}^{-1}A_{12}x_2.$$

$$x_1 := -A_{11}^{-1}A_{12}x_2$$

Helyettesítsük be a skaláris szorzatba:

$$\begin{aligned} 0 < \langle Ax, x \rangle &= \underbrace{\langle A_{11}x_1 + A_{12}x_2, x_1 \rangle}_0 + \langle A_{21}x_1 + A_{22}x_2, x_2 \rangle = \\ &= \langle A_{21}(-A_{11}^{-1}A_{12}x_2) + A_{22}x_2, x_2 \rangle = \\ &= \langle (-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} + A_{22})x_2, x_2 \rangle = \\ &= \langle (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})x_2, x_2 \rangle = \langle [A|A_{11}]x_2, x_2 \rangle \end{aligned}$$



Biz.: 4.) Szigorúan diagonálisan domináns a soraira $k = 1$ esetén:

A GE az első sort nem változtatja, ezen a szig. diag. dom. megmarad. Be kellene látnunk, hogy $i = 2, \dots, n$ -re

$$|a_{ii}^{(1)}| > \sum_{j=2, j \neq i}^n |a_{ij}^{(1)}|.$$

A GE képleteit behelyettesítve

$$\left| a_{ii} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1i} \right| > \sum_{j=2, j \neq i}^n \left| a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1j} \right|.$$

Szorozzuk be mindkét oldalt $|a_{11}| \neq 0$ -val

$$|a_{ii} a_{11} - a_{i1} a_{1i}| > \sum_{j=2, j \neq i}^n |a_{ij} a_{11} - a_{i1} a_{1j}| \quad (i = 2, \dots, n).$$

Megmaradási tételek bizonyítása

A kapott egyenlőtlenség bal oldalát lefelé, jobb oldalát felfelé becsljük

$$|a_{ii}a_{11}| - |a_{i1}a_{1i}| > \sum_{j=2, j \neq i}^n (|a_{ij}a_{11}| + |a_{i1}a_{1j}|) \quad (i = 2, \dots, n).$$

A továbbiakban ezt fogjuk belátni. Az 1. sort a GE helyben hagyja, ezért itt továbbra is igaz, hogy $|a_{11}| > \sum_{j=2}^n |a_{1j}|$
Szorozzuk $|a_{i1}| \neq 0$ -val és vegyük külön az i . tagot:

$$|a_{11}a_{i1}| > |a_{1i}a_{i1}| + \sum_{j=2, j \neq i}^n |a_{1j}a_{i1}|.$$

Írjuk fel a szigorúan diagonálisan dominanciát az $i = 2, \dots, n$ -re
 $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| = |a_{i1}| + \sum_{j=2, j \neq i}^n |a_{ij}|.$
Szorozzuk $|a_{11}|$ -gyel mindkét oldalt:

$$|a_{ii}a_{11}| > |a_{i1}a_{11}| + \sum_{j=2, j \neq i}^n |a_{ij}a_{11}|.$$

Becsüljük $|a_{ij}a_{11}|$ -t alulról

$$|a_{ij}a_{11}| > |a_{1i}a_{i1}| + \sum_{j=2, j \neq i}^n (|a_{1j}a_{i1}| + |a_{ij}a_{11}|).$$

Átrendezve a bizonyítandó állítást kapjuk

$$|a_{ij}a_{11}| - |a_{1i}a_{i1}| > \sum_{j=2, j \neq i}^n (|a_{1j}a_{i1}| + |a_{ij}a_{11}|).$$

Nézzük meg, hogy korábban mivel szoroztunk:

- Ha $a_{i1} = 0$, akkor ezen a soron nem változtat a GE, tehát a diag. dominancia nem változik.
- $a_{11} \neq 0$, mivel ez feltétele a GE-nak.

Az oszlopokra vonatkozó bizonyítás analóg módon elvégezhető. \square

- 1 Megmaradási tételek
- 2 Rövidített GE (progonka módszer)
- 3 LDU -felbontás
- 4 Cholesky-felbontás

Rövidített GE (progonka módszer)

A gyakorlatban megszokott, hogy tridiagonális (háromátlós) LER-t kell megoldanunk. Az év eleji példában is láttuk, de köbös spline-ok meghatározása esetén is ilyen alakú LER-t kapunk. A speciális alakot felhasználva hatékonyabb alakot algoritmust készítünk.

- Tárolás: n^2 helyett $3n - 2$ elem.
- Műveletigény: $\frac{2}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$ helyett $8n + \mathcal{O}(1)$.

Mivel a GE a sávszélességet megtartja, tridiagonális esetben a három átlón kívül mindig nulla lesz. A GE végén kapott U mátrix is csak két átlót tartalmaz, ezért a visszahelyettesítés i . egyenlete

$$a_{ii}^{(i-1)} x_i + a_{ii+1}^{(i-1)} x_{i+1} = a_{in+1}^{(i-1)}.$$

Ebből x_i -t kifejezve, új jelölésrendszerrel $x_i = f_i x_{i+1} + g_i$ ($i = 1, \dots, n$) alakú.

Rövidített GE (progonka módszer)

Jelölések: $A = \text{tridiag}(\beta_{i-1}, \alpha_i, \gamma_i),$

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \gamma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \gamma_2 & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \beta_{n-2} & \alpha_{n-1} & \gamma_{n-1} \\ 0 & & 0 & \beta_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}.$$

A LER 1. egyenlete:

$$\alpha_1 x_1 + \gamma_1 x_2 = b_1 \rightarrow \alpha_1 x_1 = -\gamma_1 x_2 + b_1 \rightarrow x_1 = -\frac{\gamma_1}{\alpha_1} x_2 + \frac{b_1}{\alpha_1}$$

Az $x_1 = f_1 x_2 + g_1$ alakot keresve $f_1 = -\frac{\gamma_1}{\alpha_1}$ és $g_1 = \frac{b_1}{\alpha_1}$.

Rövidített GE (progonka módszer)

Tegyük fel, hogy f_1, \dots, f_{i-1} és g_1, \dots, g_{i-1} , továbbá az $x_k = f_k x_{k+1} + g_k$ ($k = 1, \dots, i-1$) rekurzió ismert. Az $x_i = f_i x_{i+1} + g_i$ rekurzió képleteit szeretnénk meghatározni. Írjuk fel az i . egyenletet és helyettesítsük be x_{i-1} helyére a rekurziót:

$$\beta_{i-1} x_{i-1} + \alpha_i x_i + \gamma_i x_{i+1} = b_i$$

$$\beta_{i-1} (f_{i-1} x_i + g_{i-1}) + \alpha_i x_i + \gamma_i x_{i+1} = b_i$$

$$(\beta_{i-1} f_{i-1} + \alpha_i) x_i + \gamma_i x_{i+1} = b_i - \beta_{i-1} g_{i-1}$$

$$(\alpha_i + \beta_{i-1} f_{i-1}) x_i = -\gamma_i x_{i+1} + (b_i - \beta_{i-1} g_{i-1})$$

$$x_i = -\frac{\gamma_i}{\alpha_i + \beta_{i-1} f_{i-1}} x_{i+1} + \frac{b_i - \beta_{i-1} g_{i-1}}{\alpha_i + \beta_{i-1} f_{i-1}}.$$

$$\text{Innen } f_i = -\frac{\gamma_i}{\alpha_i + \beta_{i-1} f_{i-1}} \text{ és } g_i = \frac{b_i - \beta_{i-1} g_{i-1}}{\alpha_i + \beta_{i-1} f_{i-1}}.$$

Írjuk fel az n . egyenletet és helyettesítsük be x_{n-1} helyére a rekurziót:

$$\beta_{n-1}x_{n-1} + \alpha_n x_n = b_n$$

$$\beta_{n-1}(f_{n-1}x_n + g_{n-1}) + \alpha_n x_n = b_n$$

$$(\beta_{n-1}f_{n-1} + \alpha_n)x_n = b_n - \beta_{n-1}g_{n-1}$$

$$x_n = \frac{b_n - \beta_{n-1}g_{n-1}}{\alpha_n + \beta_{n-1}f_{n-1}} =: g_n$$



Algoritmus: progonka módszer

1. lépés: $f_1 := -\frac{\gamma_1}{\alpha_1}, \quad g_1 := \frac{b_1}{\alpha_1}$

$$i = 2, \dots, n-1: \quad f_i := -\frac{\gamma_i}{\alpha_i + \beta_{i-1}f_{i-1}}$$

$$g_i := \frac{b_i - \beta_{i-1}g_{i-1}}{\alpha_i + \beta_{i-1}f_{i-1}}$$

$$g_n := \frac{b_n - \beta_{n-1}g_{n-1}}{\alpha_n + \beta_{n-1}f_{n-1}}$$

2. lépés: $x_n := g_n$

$$i = n-1, n-2, \dots, 1: \quad x_i = f_i x_{i+1} + g_i$$

Megj.: 3 művelettel több, de könnyebben megjegyezhető az algoritmus, ha f_n értékét is meghatározzuk. Ekkor $x_{n+1} := 0$ -val indítjuk a 2. lépést.

Műveletigény:

1. lépés (előre):

f_1, g_1 : 2 művelet.

A ciklus i . lépésében: a közös nevezőben 2 db, f_i -ben 1 db, g_i -ben 3 db, tehát $i = 2, \dots, n - 1$ -re összesen $6(n - 2)$ db.

g_n -ben 5 db művelet.

2. lépés (vissza):

$i = n - 1, n - 2, \dots, 1$ -re $2(n - 1)$ db művelet.

Összesen:

$2 + 6(n - 2) + 5 + 2(n - 1) = 8n - 7 = 8n + \mathcal{O}(1)$ művelet.



- ① Megmaradási tételek
- ② Rövidített GE (progonka módszer)
- ③ *LDU*-felbontás
- ④ Cholesky-felbontás

Definíció: *LDU*-felbontás

Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix *LDU*-felbontásának nevezzük az $A = L \cdot D \cdot U$ szorzatot, ha $L \in \mathcal{L}_1$ alsó háromszögmátrix, D diagonális mátrix és $U \in \mathcal{U}_1$ felső háromszögmátrix.

Előállítás *LU*-felbontásból:

Az $A = L \cdot \tilde{U}$ felbontásban $L \in \mathcal{L}_1$ jó, $D = \text{diag}(\tilde{u}_{11}, \dots, \tilde{u}_{nn})$.
 A keresett $U \in \mathcal{U}_1$ mátrixot úgy kapjuk, hogy $U = D^{-1}\tilde{U}$, azaz minden i -re \tilde{U} i . sorát \tilde{u}_{ii} -vel osztjuk. Ekkor

$$A = L\tilde{U} = LD \cdot \underbrace{(D^{-1}\tilde{U})}_U = LDU.$$

Példa: LDU -felbontás LU -felbontásból

Készítsük el példamátrixunk LDU -felbontását az LU -felbontás segítségével.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 3 \\ -4 & 5 & -2 \\ 6 & -5 & 4 \end{bmatrix}$$

Korábban láttuk, hogy

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 3 \\ -4 & 5 & -2 \\ 6 & -5 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 3 & -1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 0 & 3 \\ 0 & 5 & 4 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = L \cdot \tilde{U}.$$

Legyen $D := \text{diag}(2, 5, -1)$, $U := D^{-1}\tilde{U}$. Tehát $A = LDU$, ahol

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 3 & -1 & 1 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \frac{3}{2} \\ 0 & 1 & \frac{4}{5} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Balról D^{-1} -zel úgy szorzunk, hogy D megfelelő átlóbeli elemeivel osztjuk a megfelelő sorokat. □

Az LDU -felbontás „közvetlen” kiszámítása

Tétel: az LDU -felbontás „közvetlen” kiszámítása

Az L , D és U mátrixok elemeit jó sorrendben (lásd LU -felbontás) számolva a jobboldalon mindig ismert értékek lesznek:

$$i < j \text{ (felső)} \quad u_{ij} = \frac{1}{d_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} \cdot d_{kk} \cdot u_{kj} \right),$$

$$i = j \text{ (diag)} \quad d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} \cdot d_{kk} \cdot u_{ki},$$

$$i > j \text{ (alsó)} \quad l_{ij} = \frac{1}{d_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_{kk} \cdot u_{kj} \right).$$

A képleteket az $A = L\tilde{U}$ felbontás „közvetlen” képleteiből kapjuk:

$$\tilde{u}_{ii} \mapsto d_{ii}, \quad \tilde{u}_{kj} \mapsto d_{kk} u_{kj}.$$

Tétel: Szimmetrikus mátrix LDU -felbontása

Ha A szimmetrikus mátrix, akkor az LDU -felbontásában $U = L^T$.

Biz.: az $A = LDU$ felbontás bal oldalát szorozzuk L^{-1} -zel, jobb oldalát $(L^{-1})^T$ -tal:

$$L^{-1}A(L^{-1})^T = L^{-1} \cdot (LDU) \cdot (L^{-1})^T = DU(L^{-1})^T.$$

A bal oldali mátrixról tudjuk, hogy szimmetrikus, a jobboldali felső háromszögmátrix. Ebből következik, hogy a jobboldali mátrix diagonális mátrix. $U(L^{-1})^T \in \mathcal{U}_1$, így $U(L^{-1})^T = I$.

$$U(L^{-1})^T = I \quad \Leftrightarrow \quad U(L^T)^{-1} = I \quad \Leftrightarrow \quad U = L^T$$



Következmény:

- Szimmetrikus mátrix esetén az LDU -felbontás megtartja a szimmetriát. A teljes mátrix helyett elég pl. az alsó háromszög részét tárolni. Az $A = LDU$ felbontás valójában LDL^T -felbontás lesz, ahol szintén elég L , D -t tárolni. Ezzel a tárolás- és műveletigény kb. a felére csökken ($\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$).
- Szimmetrikus mátrix esetén az LDL^T -felbontás GE-val közvetlenül is elkészíthető.

Példa: LDU -felbontás LU -felbontásból

Készítsük el szimmetrikus példamátrixunk LDL^T -felbontását a GE segítségével.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 8 & 6 \\ 1 & 6 & 6 \end{bmatrix}$$

A GE-s hányadosokat minden lépésben az eliminált pozíciókon tudjuk tárolni: az eliminálandó mátrix rész 1. oszlopában az első elemmel leosztjuk az alatta levőket. Vonalakkal jelezzük, hogy itt már tárolásról is szó van. A jobb alsó 2×2 -es mátrix részen elvégezzük az eliminációt.

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 8 & 6 \\ 1 & 6 & 6 \end{bmatrix} \rightarrow \left[\begin{array}{c|cc} 1 & & \\ \hline 2 & 4 & 4 \\ 1 & 4 & 5 \end{array} \right] \rightarrow$$

Ugyanúgy dolgozunk tovább, de most már csak a jobb alsó 2×2 -es mátrix részen, a többi változatlanul leírjuk.

$$\left[\begin{array}{c|cc} 1 & & \\ \hline 2 & 4 & 4 \\ 1 & 4 & 5 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{c|cc} 1 & & \\ \hline 2 & 4 & \\ 1 & 1 & 1 \end{array} \right]$$

Készen vagyunk, csak le kell olvasnunk a felbontást: $A = LDL^T$, ahol

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad L^T = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$



Az LDL^T -felbontás „közvetlen” kiszámítása

Tétel: az LDL^T -felbontás „közvetlen” kiszámítása

Az L és U mátrixok elemei a következő képletekkel számolhatók:

$$\begin{aligned} i = j \text{ (diag)} \quad d_{ii} &= a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} \cdot d_{kk} \cdot l_{ik}, \\ i > j \text{ (alsó)} \quad l_{ij} &= \frac{1}{d_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot d_{kk} \cdot l_{jk} \right). \end{aligned}$$

Ha jó sorrendben számolunk, mindig ismert az egész jobb oldal.

- 1 Megmaradási tételek
- 2 Rövidített GE (progonka módszer)
- 3 *LDU*-felbontás
- 4 Cholesky-felbontás

Definíció: Cholesky-felbontás, avagy LL^T -felbontás

Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ szimmetrikus mátrix Cholesky-felbontásának nevezzük az $L \cdot L^T$ szorzatot, ha $A = LL^T$, ahol $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ alsó háromszögmátrix és $l_{ii} > 0$ ($i = 1, \dots, n$).

Tétel: Cholesky-felbontás $\exists!$

Ha A szimmetrikus és pozitív definit mátrix, akkor egyértelműen létezik Cholesky-felbontása.

Cholesky-felbontás egyértelműség bizonyítása

Biz.: Egyértelműség: Tegyük fel indirekt, hogy létezik legalább két különböző felbontás,

$$A = L_1 L_1^\top = L_2 L_2^\top,$$

ahol $L_1, L_2 \in \mathcal{L}$, melyek diagonális elemei pozitívak.

Legyen $D_1 = \text{diag}((L_1)_{ii})$ és $D_2 = \text{diag}((L_2)_{ii})$.

$$\underbrace{(L_1 D_1^{-1})}_{\in \mathcal{L}_1} \cdot \underbrace{(D_1 L_1^\top)}_{\in \mathcal{U}} = \underbrace{(L_2 D_2^{-1})}_{\in \mathcal{L}_1} \cdot \underbrace{(D_2 L_2^\top)}_{\in \mathcal{U}}$$

A két oldalon egy-egy LU -felbontást látunk. Mivel az LU -felbontás egyértelmű (a főminorok nem nullák): $D_1 L_1^\top = D_2 L_2^\top$.

A főátlókban lévő elemek egyeznek, ezért $(L_1)_{ii}^2 = (L_2)_{ii}^2 \quad \forall i$ -re.

A diagonális elemek pozitivitása miatt

$$\forall i: (L_1)_{ii} = (L_2)_{ii} \quad \Rightarrow \quad L_1 = L_2 \quad \Rightarrow \quad D_1 = D_2.$$

Ezzel ellentmondásra jutottunk.

Cholesky-felbontás létezés bizonyítása

Létezés: Mivel A szimmetrikus és pozitív definit, ezért $D_k = \det(A_k) > 0$ ($k = 1, \dots, n$). A főminorok pozitivitásából következik, hogy $\exists!$ $A = \tilde{L}\tilde{U}$ LU-felbontás és $\tilde{u}_{ii} > 0 \quad \forall \quad i$ -re. Legyen $D = \text{diag}(\sqrt{\tilde{u}_{11}}, \dots, \sqrt{\tilde{u}_{nn}})$, így

$$A = \underbrace{(\tilde{L}D)}_B \cdot \underbrace{(D^{-1}\tilde{U})}_C = B \cdot C.$$

$B, C \in \mathcal{L}$, átlójuk egyaránt a \tilde{u}_{ii} elemekből áll. Be kell még látnunk, hogy $C^\top = B$.

A szimmetria miatt $A = A^\top$, azaz $BC = C^\top B^\top$.

Bal oldalról szorozzunk B^{-1} -zel, jobbról $(B^\top)^{-1}$ -zel:

$$B^{-1}(BC)(B^\top)^{-1} = B^{-1}(C^\top B^\top)(B^\top)^{-1}$$

$$\mathcal{U}_1 \in C(B^\top)^{-1} = B^{-1}C^\top \in \mathcal{L}_1$$

$$B^{-1}C^\top = I \Leftrightarrow C^\top = B$$



Miért jó az LL^T -felbontás?

Tegyük fel, hogy

- az $Ax = b$ LER megoldható,
- A szimmetrikus és
- rendelkezésünkre áll az $A = LL^T$ felbontás.

Ekkor $Ax = L \cdot \underbrace{L^T \cdot x}_y = b$ helyett $(\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2))$

- 1 oldjuk meg az $Ly = b$ alsó háromszögű, $(n^2 + \mathcal{O}(n))$
- 2 majd az $L^T x = y$ felső háromszögű LER-t. $(n^2 + \mathcal{O}(n))$

Persze valamikor elő kell állítani az LL^T -felbontást, de csak L -et kell tárolni hozzá. $(\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2))$

Előnyös, ha sokszor ugyanaz A .

1. előállítási módszer: LU -felbontásból LDU -n keresztül.

- Legyen az A mátrix LU -felbontása: $A = \tilde{L}\tilde{U}$.
- Ha A poz. def., akkor \tilde{U} főátlóbeli elemei mind pozitívak. (!)
(Látjuk, hogy elkészíthető-e a Cholesky-felbontás.)
- Legyen $D := \text{diag}(\tilde{u}_{1,1}, \dots, \tilde{u}_{n,n})$, valamint $U = D^{-1}\tilde{U}$.
- Kiderül, hogy szimmetrikus A esetén $U = \tilde{L}^\top$. ($A = \tilde{L}D\tilde{L}^\top$)
- $\sqrt{D} := \text{diag}(\sqrt{\tilde{u}_{1,1}}, \dots, \sqrt{\tilde{u}_{n,n}})$ jelöléssel most

$$A = \underbrace{\tilde{L}}_L \cdot \underbrace{\sqrt{D}}_{L^\top} \cdot \underbrace{\sqrt{D}}_{L^\top} \cdot \underbrace{\tilde{L}^\top}_L = L \cdot L^\top.$$

Megj.: Nem szükséges az LDL^\top -felbontást előállítani, \tilde{U} elemeit felhasználva egyből az utolsó pontra térhetünk.

2. előállítási módszer: „mechanikusan” a GE-n keresztül.

- Az a_{11} helyére $\sqrt{a_{11}}$ -et írunk.
- Végigosztjuk az 1. oszlopot $\sqrt{a_{11}}$ -gyel.
- Eliminálunk a maradék $(n - 1) \times (n - 1)$ -es mátrixban.
- Megyünk tovább. . .
- A végén csak az alsó háromszögmátrixot olvassuk ki.

3. előállítási módszer: mátrixszorzás alapján.

Tétel: az LL^T -felbontás „közvetlen” kiszámítása

Az L mátrix elemei az A alsóháromszögbeli elemeiből a következő képletekkel számolhatók:

$$\begin{aligned} i = j \text{ (átló)} \quad & l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}, \\ i > j \text{ (alsó)} \quad & l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk} \right). \end{aligned}$$

Ha jó sorrendben számolunk, mindig ismert az egész jobb oldal.

Az LU -felbontás „közvetlen” kiszámítása

Biz.: Az LU -felbontáshoz hasonlóan. Írjuk fel az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix, mint mátrixszorzat i -edik sorának j -edik elemét feltéve, hogy $A = L \cdot L^\top$. Használjuk ki, hogy háromszögmátrixokról van szó, majd válasszunk le egy tagot.

Ha $i = j$, azaz egy főátlóbeli elemről van szó, akkor $k > j \Rightarrow l_{j,k} = 0$, valamint $(L^\top)_{kj} = l_{jk}$, és így

$$a_{jj} = \sum_{k=1}^n l_{jk} \cdot (L^\top)_{kj} = \sum_{k=1}^j l_{jk}^2 = l_{jj}^2 + \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2.$$

Ebből l_{jj} kifejezhető

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}.$$

Az LU -felbontás „közvetlen” kiszámítása

Biz. folyt. Ha $i > j$, azaz egy főátló alatti elemről van szó, akkor

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} \cdot (L^{\top})_{kj} = \sum_{k=1}^j l_{ik} \cdot l_{jk} = l_{ij} \cdot l_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk}.$$

Ha $l_{jj} \neq 0$ (találkoztunk már ezzel a feltétellel), akkor l_{ij} kifejezhető

$$l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk} \right).$$

Figyeljük meg, hogy ha valamely „jó sorrendben” (lásd LU -felbontásnál a sorrendek) megyünk végig az (i, j) indexekkel A alsóháromszögbeli elemein, akkor az l_{ij} illetve l_{jj} értékét megadó egyenlőségek jobb oldalán minden mennyiség ismert. □

A Cholesky-felbontás műveletigénye

Tétel: A Cholesky-felbontás előállításának műveletigénye

A szorzások és osztások száma

$$\frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2),$$

valamint n darab négyzetgyökvonás is szükséges.

Biz.: A képletekből:

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2}, \quad l_{ij} = \frac{1}{l_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot l_{jk} \right).$$

Rögzített j -re: l_{jj} -hez $2(j-1)$ szorzás és összeadás kell.

Rögzített i, j -re: l_{ij} -hez 1 osztás, $(j-1)$ szorzás és $(j-1)$ összeadás kell. Összesen $2j-1$ művelet.

$$\begin{aligned}
 & \sum_{j=1}^n 2(j-1) + \sum_{i=2}^n \sum_{j=1}^{i-1} (2j-1) = \\
 & \sum_{s=1}^{n-1} 2s + \sum_{i=2}^n \left(2 \cdot \frac{(i-1)i}{2} - (i-1) \right) = \\
 & \sum_{s=1}^{n-1} 2s + \sum_{i=2}^n (i-1)^2 = \sum_{s=1}^{n-1} 2s + \sum_{t=1}^{n-1} t^2 \\
 & = 2 \cdot \frac{(n-1)n}{2} + \frac{(n-1)n(2n-1)}{6} = \frac{1}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2). \quad \square
 \end{aligned}$$

Példa

Készítsük el a következő (szimmetrikus, pozitív definit) mátrix Cholesky-felbontását

- (a) az LU -felbontás alapján,
- (b) „mechanikusan”.

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 10 & 5 \\ 4 & 5 & 6 \end{pmatrix}.$$

LU-felbontásból: A mátrixon elvégezzük a GE lépéseit:

1. lépés:

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 10 & 5 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} \rightarrow \left[\begin{array}{c|cc} 4 & 2 & 4 \\ \hline \frac{1}{2} & 9 & 3 \\ \hline 1 & 3 & 2 \end{array} \right] \rightarrow$$

2. lépés:

$$\left[\begin{array}{c|cc} 4 & 2 & 4 \\ \hline \frac{1}{2} & 9 & 3 \\ \hline 1 & 3 & 2 \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{c|cc} 4 & 2 & 4 \\ \hline \frac{1}{2} & 9 & 3 \\ \hline 1 & \frac{1}{3} & 1 \end{array} \right]$$

Készen vagyunk az eliminációval, csak le kell olvasnunk \tilde{L} , \tilde{U} -ot.

$$A = \tilde{L} \cdot \tilde{U} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 1 & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 0 & 9 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 10 & 5 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix}.$$

$$D = \text{diag}(\sqrt{4}, \sqrt{9}, \sqrt{1}) = \text{diag}(2, 3, 1).$$

$$L = \tilde{L} \cdot D = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 1 & \frac{1}{3} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

A diagonális mátrix-szal jobbról szorzás az \tilde{L} megfelelő oszlopait szorozza az átlóbeli elemekkel. □

„**Mechanikusan**” közvetlenül a **GE-ből**: Az a_{11} helyére $\sqrt{a_{11}}$ -et írunk. Végigosztjuk az 1. oszlopot $\sqrt{a_{11}}$ -gyel. A jobb alsó 2×2 -es mátrix részen elvégezzük az 1. sor segítségével az eliminációt.

$$\begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 10 & 5 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix} \rightarrow \left[\begin{array}{c|cc} 2 & 9 & 3 \\ \hline 1 & 3 & 2 \\ 2 & & \end{array} \right] \rightarrow$$

Ugyanúgy dolgozunk tovább, de most már csak a jobb alsó 2×2 -es mátrix részen, a többit változatlanul leírjuk.

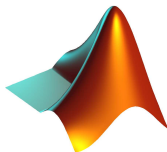
$$\left[\begin{array}{c|cc} 2 & 9 & 3 \\ \hline 1 & 3 & 2 \\ 2 & & \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{c|cc} 2 & 3 & \\ \hline 1 & 1 & 1 \\ 2 & & \end{array} \right] \rightarrow \left[\begin{array}{c|cc} 2 & 3 & \\ \hline 1 & 1 & \sqrt{1} \\ 2 & & \end{array} \right]$$

Az utolsó átlóbeli elemből ne felejtünk el gyököt vonni.

Készen vagyunk, ellenőrizhetjük a Cholesky-felbontást:

$$A = L \cdot L^T = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 3 & 0 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 0 & 3 & 1 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 \\ 2 & 10 & 5 \\ 4 & 5 & 6 \end{bmatrix}.$$





- 1 Példák pozitív definit mátrixokra,