Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

11. Metody bezpośrednie rozwiązywania układów równań liniowych

Marian Bubak, Katarzyna Rycerz

Department of Computer Science
AGH University of Science and Technology
Krakow, Poland
kzajac@agh.edu.pl
dice.cyfronet.pl

Contributors
Anna Marciniec
Radosław Kazior
Kamil Doległo

Outline

Wstęp

Układy równań liniowych

$$\begin{aligned} E_1 &: a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ &\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\ E_n &: a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{aligned}$$

Podstawą metod bezpośrednich są operacje elementarne, które nie zmieniają rozwiązań układów równań.

Operacje elementarne

Operacje elementarne:

- $(\lambda E_i) \to E_i$ Pomnożenie (podzielenie) przez dowolną niezerową liczbę dowolnie wybranego wiersza macierzy.
- $(E_i + \lambda E_j) \to E_i$ Dodanie do dowolnie wybranego wiersza macierzy wielokrotności innego wiersza
- $E_i \leftrightarrow E_j$ Zamiana miejscami dwóch dowolnych wierszy macierzy.

gdzie λ-stała różna od zera

Celem jest uzyskanie postaci trójkątnej: (triangular or reduced form)

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ 0 + a'_{22}x_2 + \cdots + a'_{2n}x_n &= b'_2 \\ &\vdots \\ 0 + \cdots + 0 + a'_{nn}x_n &= b'_n \end{aligned}$$

i wtedy ostanią niewiadomą możemy wyliczyć wprost:

$$x_n = \frac{b'_n}{a'_{nn}}$$

A potem wszystkie pozostałe poprzez podstawianie wsteczne(backward substitution)

$$x_i = \frac{1}{a'_{ii}}(b'_i - \sum_{j=i+1}^{n} a'_{ij}x_j)$$

Gaussian elimination

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix} \quad \frac{a_{21}}{a_{11}} \quad \}- \quad \frac{a_{31}}{a_{11}} \quad \}-$$

Aby to zadziałało $a_{11} \neq 0$.
Po pierwszym etapie mamy:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \end{pmatrix}$$

$$a_{22}^{(2)} = a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} \cdot a_{12}, a_{23}^{(2)} = \ldots,$$

$$a_{32}^{(2)} = a_{32} - \frac{a_{31}}{a_{11}} \cdot a_{12}, a_{33}^{(2)} = \ldots,$$

$$b_2^{(2)} = b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} \cdot b_1, \; b_3^{(2)} = b_3 - \frac{a_{31}}{a_{11}} \cdot b_1,$$

Gaussian elimination

W wyniku następnego etapu otrzymamy:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \end{pmatrix} \quad \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad \}-$$

$$U = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \end{pmatrix}, \; c = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(3)} \end{pmatrix}$$

$$a_{33}^{(3)} = a_{33}^{(2)} - \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \cdot a_{23}^{(2)}$$

$$b_3^{(3)} = b_3^{(2)} - \frac{a_{32}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \cdot b_2^{(2)}$$

Ogólnie po k etapach otrzymujemy:
$A^{(k+1)} \cdot x = b^{(k+1)}$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{kj}^{(k)}, i, j > k \ \boxed{1a}$$

$$b_{i}^{(k+1)} = b_{i}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot b_{k}^{(k)}, i > k \ \boxed{1b}$$

przy założeniu, że $a_{kk}^{(k)} \neq 0$
Jeśli $a_{kk}^{(k)} = 0$ należy przestawic wiersze.

W efekcie $A^{(n)} = U$ staje się macierzą trójkątną górną (upper triangular)

Gaussian elimination with backward substitution

Elimination

for $\mathrm{i} := 1$ to n-1 do
begin
p :=smallest integer $in[i,\ n] : a_{pi} \neq 0$;
if no p then no unique solution exist!; STOP;
if $p \neq i$ then $E_p \leftrightarrow E_i$ /przestawienie/
for $\mathrm{j} := \mathrm{i} + 1$ to n do $(E_j - \frac{a_{ji}}{a_{ii}} E_i \rightarrow E_j)$
end
if $a_{nn} = 0$ then no unique solution exist!; STOP;

Gaussian elimination with backward substitution

Backward substitution

$x_n = b'_n / a'_{nn};$

for i := n − 1 downto 1 do $x_i = (b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j)/a_{ii};$

Złożoność obliczeniowa $O(n^3)$

Liczba działań mnożenia i dzielenia wynosi

$$\underbrace{\sum_{i=1}^{n-1}}_{\text{petla zewnetrzna}} \Big(\underbrace{(n-i)}_{\substack{\text{petla}\\ \text{wewnetrzna}}} \Big(\underbrace{1}_{\text{dzielenie} \frac{a_{ji}}{a_{ii}}} + \underbrace{n-i}_{\substack{\text{mnozenie}\\ a \text{ w } E_i}} + \underbrace{1}_{\substack{\text{mnozenie}\\ b_i}} \Big)\Big) + \underbrace{\frac{1}{2} n(n-1)}_{\substack{\text{podstawianie}\\ \text{wsteczne}}} =$$

$$= \frac{1}{3} \cdot (n^3 + 3n^2 - n)$$

Liczba działań dodawania i odejmowania wynosi

$\frac{1}{6} \cdot (2n^3 + 3n^2 - 5n)$

O wyborze elementów podstawowych - pivots

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2.099 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 3.901 \\ 6 \end{pmatrix}$$

rozwiązanie:

$$x = \begin{pmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Po "wyzerowaniu" pierwszej kolumny (arytmetyka *fl* z 5-cioma cyframi znaczącymi)

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -0.001 & 6 \\ 0 & 2.5 & 5 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 6.001 \\ 2.5 \end{pmatrix}$$

$\boxed{-0.001}$ -bardzo mały w porównaniu z pozostałymi

O wyborze elementów podstawowych - pivots

$$E_3 \leftarrow E_3 - \frac{2.5}{-0.001} \cdot E_2 = E_3 + 2.5 \cdot 10^3 \cdot E_2 :$$

$$b_3^{(3)} = 2.5 + 2.5 \cdot 10^3 \cdot 6.001 = 2.5 + \underbrace{1.50025}_{\text{wybieram 5 cyft znaczących}} \cdot 10^4 \approx$$

$$2.5 + 1.5002 \cdot 10^4$$

$$a_{33}^{(3)} \cdot x_3 = b_3^{(3)}$$

$$\underbrace{(5 + 2.5 \cdot 10^3 \cdot 6)}_{15005} \cdot x_3 = 2.5 + 1.5002 \cdot 10^4$$

$$15005 \cdot \ x_3 = 15004 \rightarrow x_3 = \frac{15004}{15005} = 0.99993$$

Prawdziwe $x_3 = 1$ - błąd wydaje się mały!

O wyborze elementów podstawowych - pivots

Ale z równania 2) :

$$-0.001 \cdot x_2 + 6 \cdot 0.99993 = 6.001$$

$$x_2 = \frac{6.001 - 5.9995}{-0.001} = \underline{-1.5}$$

Z równania 1) :

$$10 \cdot \; x_1 + (-7) \cdot (-1.5) + 0 = 7 \rightarrow x_1 = \underline{-0.35}$$

Zamiast (0,-1,1) mamy $(-0.35, \; -1.5, 0.99993)$ - Dlaczego? Przecież nie było akumulacji błędów, a macierz nie jest bliska osobliwej.

Powodem błędu jest zbyt mały element wiodący (pivot). Poszczególne wiersze dzielimy przez niego (czyli mnożymy przez dużą liczbę), więc błędy zaokrągleń stają sie duże w stosunku do współczynników oryginalnej macierzy!

O wyborze elementów podstawowych - pivots

Ogólna zasada: jeżeli w poszczególnych krokach mnożymy przez liczbę mniejszą lub równą 1, to możemy oczekiwać rozwiązania dokładnego.

Partial pivoting:

W k-tym kroku wybieramy wiersz o największym współczynniku w niezredukowanej części w k-tej kolumnie

Skalowanie - równoważenie (equalibration) macierzy

Maksymalne elementy w każdej kolumnie i każdym wierszu - tego samego rzędu

O wyborze elementów podstawowych - pivots

Np. Macierz A można zrównoważyć na dwa sposoby (dzieląc przez 10^9 pierwszą kolumnę albo drugi i trzeci wiersz):

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 10^9 & -1 & 1 \\ 10^9 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$B = \begin{pmatrix} 10^{-9} & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & -10^{-9} & 10^{-9} \\ 1 & 10^{-9} & 0 \end{pmatrix}$$

Macierz B zachowanie poprawne

Macierz C da macierz osobliwą na maszynie o mniej niż 9-ciu cyfrach znaczących

Eliminacja Gaussa - jeszcze raz

1 etap:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \end{pmatrix}$$

2 -etap:

$$U = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \end{pmatrix}, \; c = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(2)} \\ b_3^{(3)} \end{pmatrix}$$

Ogólnie po k etapach otrzymujemy:

$$A^{(k+1)} \cdot x = b^{(k+1)}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot a_{kj}^{(k)}, i, j > k \ \boxed{1a}$$

$$b_{i}^{(k+1)} = b_{i}^{(k)} - \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \cdot b_{k}^{(k)}, i > k \ \boxed{1b}$$

przy założeniu, że $a_{kk}^{(k)} \neq 0$ (w przeciwnym przypadku $\rightarrow$ zamiana wierszy)

Gaussian elimination

W efekcie $A^{(n)} = U$ - trójkątna górna (upper triangular)

wprowadzamy oznaczenie: $l_{ik} = \dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad a_{kk}^{(k)} \neq 0$

Metoda Gaussa a faktoryzacja LU

Jeśli oznaczymy:

$$L^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & 0 & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & \ddots & & \\ 0 & & \vdots & & & \\ & & -l_{n,k} & 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

Jest to macierz trójkątna dolna.
$\boxed{1a}$ możemy zapisać w postaci macierzowej

$$A^{(k+1)} = L^{(k)} \cdot A^{(k)}$$

Metoda Gaussa a faktoryzacja LU

i w konsekwencji

$$U = A^{(n)} = L^{(n-1)} \cdot L^{(n-2)} \cdot \ldots \cdot L^{(1)} \cdot A \quad (*)$$

łatwo pokazać, że:

$$(L^{(k)})^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & 0 & \\ & & 1 & & & \\ & & l_{k+1,k} & \ddots & & \\ 0 & & \vdots & & & \\ & & l_{n,k} & 0 & & 1 \end{bmatrix}$$

bo $L^{(k)} \cdot (L^{(k)})^{-1} = I$

Metoda Gaussa a faktoryzacja LU

Mnożąc (*) kolejno przez $(L^{(n-1)})^{-1}, (L^{(n-2)})^{-1}, \dots, (L^{(1)})^{-1}$ otrzymamy:

$$A = \underbrace{(L^{(1)})^{-1} \cdot (L^{(2)})^{-1} \cdot \ldots \cdot (L^{(n-1)})^{-1}} \cdot U \to A = L \cdot U$$

$$\mathrm{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ l_{21} & 1 & & 0 \\ l_{31} & l_{32} & \ddots & 0 \\ \vdots & \vdots & l_{k+1,k} & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{nk} & 1 \end{bmatrix}$$

Metoda Gaussa a faktoryzacja LU

Na każdym etapie macierze L oraz U są przechowywane w spakowanej postaci:

- do przechowywania $A^{(1)}, A^{(2)}, \ldots$ wystarczy jedna macierz
- l_{ij} są przechowywanie w miejscu powstających kolumn z zerami
- nie musimy pamiętać "1" na diagonali

Wprowadzenie

Zaleta: mając $A = L \cdot U \rightarrow$ dla dowolnego b

$$A \cdot x = b$$

Czyli:

$$L \cdot (U \cdot \mathrm{x}) = b$$

Możemy więc rozwiązać dwa równania, ale z macierzami trójkątnymi (podstawianie wsteczne):

$$L \cdot z = b \ (*)$$

$$U \cdot x = z \ (**)$$

$$(*) z_1 = \frac{b_1}{l_{11}}; z_i = \frac{1}{l_{ii}} \cdot (b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} \cdot z_j) \ , \ i = 2, 3, \ldots, n$$

$$(**) x_n = \frac{z_n}{u_{nn}}; x_i = \frac{1}{u_{ii}} \cdot (z_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} \cdot x_j) \ , \ i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

Wprowadzenie

Faktoryzacja LU w ogólności polega na znalezieniu l oraz u takich, że:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & & l_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \cdots & 0 & u_{nn} \end{pmatrix}$$

niewiadomych: $n^2 + n$ (bo dwa razy przekątna)

równań: $a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} \cdot u_{kj} \rightarrow n^2$

Wprowadzenie

Potrzeba dodatkowego warunku dla przekątnej - stosuje się różne wersje warunków dla faktoryzacji LU :

- Doolittle: $l_{ii} = 1$
- Crout: $u_{ii} = 1$
- Choleski (stosowany dla macierzy symetrycznej i dodatnio określonej): $l_{ii} = u_{ii}$

Sposób: liczymy na przemian - wiersze, kolumny, wiersze, kolumny ... w A.
Po obliczeniu - L,U zapisane w A.

Faktoryzacja Doolittle'a

LU inaczej - lepszy wgląd w kolejność obliczeń

$$\begin{bmatrix} (1) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ l_{21} & (1) & & & \\ \vdots & & & & \\ l_{i1} & l_{i2} & \cdots & (1) & 0 \\ \vdots & & & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & (1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & & \vdots \\ & & u_{ii} & u_{in} \\ & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

W i-tym wierszu macierzy L różne od 0 tylko pierwsze i elementów
Wj-tej kolumnie macierzy U różne od 0 tylko pierwsze j elementów

Faktoryzacja Doolittle'a

Dla $i \leqslant j$ np. $i = 1$, $j = 1$

$$\begin{bmatrix} (1) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ l_{21} & (1) & & & \\ \vdots & & & & \\ l_{i1} & l_{i2} & \cdots & (1) & 0 \\ \vdots & & & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & (1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & & \vdots \\ & & u_{ii} & u_{in} \\ 0 & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots \\ a_{21} & a_{22} & \cdots \\ & & \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots \\ & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots \end{bmatrix}$$

$a_{1j} = \sum_{p=1}^{n} l_{1p} \cdot u_{pj}$ ale: $l_{11} = 1$, $l_{1p} = 0$ dla $p > 1$, więc:

$u_{11} = a_{11}$

podobnie dla wszystkich $j > 1$: $u_{1j} = a_{1j}$

Faktoryzacja Doolittle'a

Dla $i > j$ np. $j = 1$, $i = 2$

$$\begin{bmatrix} (1) & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \mathrm{l}_{21} & (1) & & & 0 \\ \vdots & & & & \\ \mathrm{l}_{i1} & l_{i2} & \cdots & (1) & 0 \\ \vdots & & & & \\ \mathrm{l}_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & (1) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathrm{u}_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & & \vdots \\ & & u_{ii} & u_{in} \\ & & & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \mathrm{a}_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ & & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ & & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

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

$$\mathrm{l}_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}}$$

I ogólnie(dla $j = 1$): $\mathrm{l}_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{u_{11}}$

W kolejnych krokach analogicznie - mamy już wyliczone $k - 1$ wierszy u i k-1 kolumn l i z nich korzystamy.

Faktoryzacja Doolittle'a

W kroku k wyznaczamy $U_{k,k}, U_{k,k+1}, \ldots, U_{k,n}$ oraz (można równolegle) $L_{k+1,k}, \ldots, L_{n,k}$
Ogólnie - ze wzoru na mnożenie macierzy i z faktu, że $l_{ip} = 0$ dla $p > i$ oraz $u_{pj} = 0$ dla $p > j$

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^{\min(i,j)} l_{ip} \cdot u_{pj}, \quad i, \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

$i \leqslant j$	$i > j$
$a_{ij} = \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} \cdot u_{pj} + l_{ii} \cdot u_{ij},$ $u_{ij} = a_{ij} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} \cdot u_{pj}$	$a_{ij} = \sum_{p=1}^{j-1} l_{ip} \cdot u_{pj} + l_{ij} \cdot u_{jj}$ $l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}}(a_{ij} - \sum_{p=1}^{j-1} l_{ip} \cdot u_{pj})$

L_{ij}, U_{ij} przechowywane w L/U (bez "1" z diagonali)

Związek z eliminacją Gaussa

Eliminacja Gaussa - wielokrotne pobieranie, poprawianie $a_{i,j}$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - a_{ik}^{(k)} \cdot \underbrace{\frac{a_{kj^{(k)}}}{a_{kk}^{(k)}}}_{l_{kj}}$$

$$u_{k,j} = a_{k,j}^{(k)}$$

Różnica $\rightarrow$ kumulacja w 1 kroku

Faktoryzacja Crouta

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & & \\ l_{i1} & l_{i2} & \cdots & & \\ \vdots & \vdots & & & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & l_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & 0 & & \vdots \\ & \vdots & & u_{in} \\ & & & \vdots \\ 0 & \cdots & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{i1} & a_{i2} & \cdots & a_{in} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Faktoryzacja Crouta

Analogicznie dla faktoryzacji Doolitla: - ze wzoru na mnożenie macierzy i z faktu, że $l_{ip} = 0$ dla $p > i$ oraz $u_{pj} = 0$ dla $p > j$

$$a_{ij} = \sum_{p=1}^{\min(i,j)} l_{ip} \cdot u_{pj}, \quad i, \quad j = 1, 2, \ldots, n$$

$\mathrm{i} \geqslant \mathrm{j}$	$\mathrm{i} < \mathrm{j}$
$a_{ij} = \sum_{p=1}^{j-1} l_{ip} \cdot u_{pj} + l_{ij} \cdot u_{jj},$	$a_{ij} = \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} \cdot u_{pj} + l_{ii} \cdot u_{ij}$
$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{p=1}^{j-1} l_{ip} \cdot u_{pj}$	$u_{ij} = \frac{1}{l_{ii}}(a_{ij} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} \cdot u_{pj})$

Faktoryzacja Crouta

Ogólnie faktoryzację można zapisać w postaci $A = LDU$

Gdzie: D - diagonalna
L, U - z "1" na głównej diagonali

Wtedy faktoryzacja:
Doolittle to $L(DU)$
Crout to $LD(U)$

Faktoryzacja Choleskiego

Dygresja:

- na wektor x można patrzeć jak na jednokolumnową macierz
- na wektor transponowany x^T można patrzeć jak na jednowierszową macierz
- jeśli stosujemy zasadę mnożenia macierzy (wiersz x kolumna) to $x^T Ax$ będzie liczbą (skalarem) - sprawdzić.

Warunki dla faktoryzacji Choleskiego:

- Macierz rzeczywista
- Macierz symetryczna $a_{ij} = a_{ji}$ czyli $A = A^T$
- Dodatnio określona czyli: $x^T Ax > 0$ dla każdego wektora x

Dla faktoryzacji $A = LDU$:
ponieważ macierz A jest symetryczna i dodatnio określona, to mozna pokazać, że:

$$l_{ij} = u_{ij}, \ i \geqslant j$$

czyli $U = L^T$ czyli $A = LDL^T$
Dodatkowo, jeżeli A jest dodatnio określona, to
$d_{ii} > 0, \ \mathrm{i} = 1, \ldots, \mathrm{n}$
Czyli można utworzyć $D^{\frac{1}{2}}$, takie że $D^{\frac{1}{2}} D^{\frac{1}{2}} = D$, gdzie $d_{ii}^{\frac{1}{2}} = \sqrt{d_{ii}}$

$$A = (LD^{\frac{1}{2}})(D^{\frac{1}{2}} L^T) = \overline{L}\, \overline{L}^T$$

i ta faktoryzacja nosi nazwę Choleskiego

Faktoryzacja Choleskiego

Dla faktoryzacji:

$$A = \overline{L}\,\overline{L}^T$$

Wyrazy na przekątnej $\overline{L}$ obliczamy:

$$l_{kk} = \sqrt{\left(a_{kk} - \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks}^2\right)}$$

Pozostałe, dla $i > k$:

$$l_{ik} = \frac{\left(a_{ik} - \sum_{s=1}^{k-1} l_{is} l_{ks}\right)}{l_{kk}}$$

Faktoryzacja blokowa

Cel: jeśli mamy zoptymalizowane operacje na macierzach (BLAS level 3) to należy ich użyć.

Przypadek 1) L,U - dowolne:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 \\ L_{21} & L_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{pmatrix}$$

$A_{11}, \ldots$ - kwadratowe
$L_{11}, L_{22} -$ - trójkątne dolne
$U_{11}, U_{22} -$ trójkątne górne

$$A_{11} = L_{11} \cdot U_{11} \quad A_{21} = L_{21} \cdot U_{11}$$

$$A_{12} = L_{11} \cdot U_{12} \quad A_{22} = L_{21} \cdot U_{12} + L_{22} \cdot U_{22}$$

Faktoryzacja blokowa

Sposób wyznaczania L i U:

1. $A_{11} = L_{11} \cdot U_{11} \rightarrow$
L_{11}, U_{11} obliczamy stosując faktoryzację LU dla A_{11}

2. $L_{11} \cdot U_{12} = A_{12} \rightarrow$
kolumny U_{12} obliczamy stosując podstawianie wsteczne

3. $L_{21} \cdot U_{11} = A_{21} \rightarrow$
wiersze L_{21} obliczamy stosując podstawianie w przód

4. Tworzymy pomocniczą macierz
$\dot{A}_{22} = A_{22} - L_{21} \cdot U_{12} = L_{22} \cdot U_{22}$, a następnie stosujemy faktoryzację $\dot{A}_{22}$ dla obliczenia L_{22} oraz U_{22}

Faktoryzacja blokowa

Przypadek 2) L,U- trójkatne, ale z identycznościami na przekątnej w U:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ A_{21} & \bar{A}_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} I & \bar{U}_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

$A_{12} = A_{11} \cdot \bar{U}_{12} \rightarrow$ kolumny $\bar{U}_{12}$ znajdujemy rozwiązując odpowiednie układy równań

$\bar{A}_{22} = A_{22} - A_{21} \cdot \bar{U}_{12} \rightarrow$ obliczamy wykonując operacje na macierzach.

Faktoryzacja blokowa

Przypadek 2) L,U- trójkatne, ale z identycznościami na przekątnej w L

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ \ddot{L}_{21} & I \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & \ddot{A}_{22} \end{pmatrix}$$

$\ddot{L}_{21} \cdot A_{11} = A_{21} \rightarrow \ddot{L}_{21}$ znajdujemy rozwiązując odpowiednie układy równań

$\ddot{A}_{22} = A_{22} - \ddot{L}_{21} \cdot A_{12} \rightarrow$ znajdujemy stosując operacje macierzowe

zachodzi $\dot{A}_{22} = \bar{A}_{22} = \ddot{A}_{22}$ (Zaniedbując błędy obliczeń)

Macierze te nazywamy uzupełnieniami Schura (Schur complement)

Faktoryzacja blokowa

Przykładowo pokażemy kolejne kroki obliczeniowe dla przypadku 2 czyli rozkładu

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ A_{21} & \bar{A}_{22} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} I & \bar{U}_{12} \\ 0 & I \end{pmatrix}$$

Faktoryzacja blokowa

Równanie $\mathrm{Ax} = \mathrm{b}$ rozwiązujemy w następujący sposób:

$$\overline{L} \cdot \overline{y} = b$$

$$\begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ A_{21} & \overline{A_{22}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow$$

$$\begin{aligned} A_{11} \cdot y_1 &= b_1 \\ A_{21} \cdot y_1 + \overline{A_{22}} \cdot y_2 &= b_2 \\ \overline{A_{22}} \cdot y_2 &= b_2 - A_{21} \cdot y_1 \end{aligned}$$

$$\overline{U} \cdot x = y$$

$$\begin{pmatrix} I & \overline{U_{12}} \\ 0 & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

$$\downarrow$$

$$\begin{aligned} x_1 &= y_1 - \overline{U_{12}} \cdot x_2 \\ x_2 &= y_2 \end{aligned}$$