

Yıldız Teknik Üniversitesi Kimya-Metalurji Fakültesi Matematik Mühendisliği

MKT2521 Nümerik Analiz 1
Dr. Öğr. Üyesi Fatih Aylıkçı

LU Ayrışımı (Decomposition)

GİRİŞ:

Herhangi bir A kare matrisinin, bir L alt üçgen matrisi ve bir U üst üçgen matrisinin çarpımı ile ifade edilmesini göstermek mümkündür.

$$A = LU$$

$$U = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{bmatrix}, \quad L = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix}$$

Verilen bir A matrisi için L ve U 'yu hesaplama işlemi LU ayrışımı veya LU çarpanlara ayırma (factorization) olarak bilinir.

Doolittle ayrışımı $L_{ii} = 1, i = 1, 2, \dots, n$

Crout ayrışımı $U_{ii} = 1, i = 1, 2, \dots, n$

Choleski ayrışımı $L = U^T$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Doolittle Ayrışım Metodu:
Ayrışım Aşaması

3x3'lük bir matris düşünelim ve

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ L_{21} & 1 & 0 \\ L_{31} & L_{32} & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{bmatrix}$$

Üçgen matrisleri var olsun. $A = LU$ sağlanın. Sağ tarafta çarpım tamamlandıktan sonra

$$A = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{11}L_{21} & U_{12}L_{21} + U_{22} & U_{13}L_{21} + U_{23} \\ U_{11}L_{31} & U_{12}L_{31} + U_{22}L_{32} & U_{13}L_{31} + U_{23}L_{32} + U_{33} \end{bmatrix}$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Gauss eliminasyon yöntemi uygulanırsa;

$$A = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ U_{11}L_{21} & U_{12}L_{21} + U_{22} & U_{13}L_{21} + U_{23} \\ U_{11}L_{31} & U_{12}L_{31} + U_{22}L_{32} & U_{13}L_{31} + U_{23}L_{32} + U_{33} \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{R_2 - L_{21}R_1} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & U_{22}L_{32} & U_{23}L_{32} + U_{33} \end{bmatrix} = A', (\text{işki satır pivot satır})$$

$$\xrightarrow{R_3 - L_{32}R_2} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{bmatrix} = A'', (\text{ikinci satır pivot satır})$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Çarpanları, katsayılar ortadan kaldırıldıkları zaman değiştirerek katsayı matrisinin alt üçgen kısmında saklamak olağan bir uygulamadır.

$$[L \setminus U] = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ L_{21} & U_{22} & U_{23} \\ L_{31} & L_{32} & U_{33} \end{bmatrix}$$

Çözüm Aşaması:

Şimdi ileri yerine koyma ile $Ly = b$ çözüm prosedürünü düşünelim:

$$y_1 = b_1$$

$$L_{21}y_1 + y_2 = b_2$$

M

$$L_{k1}y_1 + L_{k2}y_2 + \dots + L_{k,k-1}y_{k-1} + y_k = b_k$$

M

LU Ayrışımı (Decomposition)

Örnek: $Ax = b$ denklem sistemini çözmek için Doolittle ayrışım metodunu kullanınız.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 1 & 6 & -1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 7 \\ 13 \\ 5 \end{bmatrix}$$

Çözüm: Önce A 'yı Gauss eliminasyon metoduyla ayırtıralım.

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 1 & 6 & -1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix} \xrightarrow{\substack{R_2 - R_1 \\ R_3 - 2R_1}} \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & -9 & 0 \end{bmatrix}, \quad L_{21} = 1, L_{31} = 2 \quad \xrightarrow{R_3 - \left(-\frac{9}{2}\right)R_2} \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & -9 \end{bmatrix}, \quad L_{32} = -\frac{9}{2}$$

$$A'' = [L \setminus U] = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 1 & 2 & -2 \\ 2 & -4.5 & -9 \end{bmatrix}$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Ayrışım

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & -4.5 & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 1 & 4 & 1 \\ 0 & 2 & -2 \\ 0 & 0 & -9 \end{bmatrix}$$

ile tamamlanmıştır.

Sırada ileri yerine koyma ile $Ly = b$ 'nin çözümü var. Denklemin artırılmış katsayı formu

$$[L \mid b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & 7 \\ 1 & 1 & 0 & 13 \\ 2 & -4.5 & 1 & 5 \end{array} \right]$$

Çözüm: $y_1 = 7$,

$$y_1 + y_2 = 13 \rightarrow y_2 = 6,$$

$$2y_1 - 4.5y_2 + y_3 = 5 \rightarrow y_3 = 18,$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Sonuç olarak; $Ux = y$

$$[U \mid y] = \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 4 & 1 & 7 \\ 0 & 2 & -2 & 6 \\ 0 & 0 & -9 & 18 \end{array} \right]$$

Çözüm: $x_3 = -2,$

$$2x_2 - 2x_3 = 6 \rightarrow x_2 = 1,$$

$$x_1 + 4x_2 + x_3 = 7 \rightarrow x_1 = 5,$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Choleski Ayrışımı:

$A = LL^T$ Choleski ayrışımının iki sınırlaması vardır:

LL^T matris çarpımı simetrik olduğu için Choleski ayrışımı A 'nın simetrik olmasına ihtiyaç duyar.

Ayrışma işlemi A 'nın elemanlarının belirli kombinasyonlarının kareköklerinin alınmasını içerir. Negatif sayıların kareköklerinin alınmasının yalnızca A 'nın pozitif tanımlı olması ile önlenebileceği gösterilebilir.

Choleski ayrışımı, özellikle yukarıda listelenen kısıtlamalar nedeniyle, eşzamanlı denklemleri çözmede özellikle popüler bir yöntem değildir. Burada çalışıyoruz, çünkü yöntemin diğer bazı uygulamalardaki kullanımı avantajlıdır.

$$A = LL^T$$

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} L_{11} & L_{21} & L_{31} \\ 0 & L_{22} & L_{32} \\ 0 & 0 & L_{33} \end{bmatrix}$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Sağ taraftaki matris çarpımı tamamlandıktan sonra

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11}^2 & L_{11}L_{21} & L_{11}L_{31} \\ L_{11}L_{21} & L_{21}^2 + L_{22}^2 & L_{21}L_{31} + L_{22}L_{32} \\ L_{11}L_{31} & L_{21}L_{31} + L_{22}L_{32} & L_{31}^2 + L_{32}^2 + L_{33}^2 \end{bmatrix}$$

A ve LL^T matrislerinin terim terime eşitlenmesiyle L'nin altı bilinmeyen bileşeni için altı denklem elde edilir. Bu denklemleri belli bir sırayla çözerek denklemde bilinmeyen bir taneye sahip olmak mümkündür. İlk sütundaki öğeleri eşitleyerek, ilk satırdan başlayıp aşağı doğru ilerleyerek L_{11} , L_{21} ve L_{31} şu sıradan hesaplanabilir:

$$A_{11} = L_{11}^2 \rightarrow L_{11} = \sqrt{A_{11}}$$

$$A_{21} = L_{11}L_{21} \rightarrow L_{21} = A_{21} / L_{11}$$

$$A_{31} = L_{11}L_{31} \rightarrow L_{31} = A_{31} / L_{11}$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

$$A_{22} = L_{21}^2 + L_{22}^2 \rightarrow L_{22} = \sqrt{A_{22} - L_{21}^2}$$

$$A_{32} = L_{21}L_{31} + L_{22}L_{32} \rightarrow L_{32} = (A_{32} - L_{21}L_{31}) / L_{22}$$

$$A_{33} = L_{31}^2 + L_{32}^2 + L_{33}^2 \rightarrow L_{33} = \sqrt{A_{33} - L_{31}^2 - L_{32}^2}$$

Şimdi bir nxn matris için sonuçları tahmin edebiliriz:

$$(LL^T)_{ij} = L_{i1}L_{j1} + L_{i2}L_{j2} + \dots + L_{ij}L_{jj} = \sum_{k=1}^j L_{ik}L_{jk}, \quad i \geq j$$

Bu terimin A'nın karşılık gelen terimi ile eşitlenmesiyle

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^j L_{ik}L_{jk}, \quad i = j, j+1, \dots, n; \quad j = 1, 2, \dots, n$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Gösterilen indeksler, elemanları alt üçgen kısma sınırlar. İlk sütun ($j=1$) için

$$L_{11} = \sqrt{A_{11}}, \quad L_{i1} = A_{i1} / L_{11}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

$i=j$ köşegenel terimleri ise

$$L_{jj} = \sqrt{A_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{jk}^2}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

Köşegenel olmayan terimler için

$$L_{ij} = \left(A_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} L_{ik} L_{jk} \right) / L_{jj}, \quad j = 2, 3, \dots, n-1; i = j+1, j+2, \dots, n$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Örnek:

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 2 & -4 \\ 2 & -4 & 11 \end{bmatrix}$$

matrisinin Choleski ayrışımını hesaplayınız.

Çözüm: Öncelikle A 'nın simetrik olmasına dikkat edelim. Ayrıca Choleski ayrışımı matrisin pozitif tanımlı olması şartıyla uygulanabilirdir.

$$\begin{bmatrix} 4 & -2 & 2 \\ -2 & 2 & -4 \\ 2 & -4 & 11 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11}^2 & L_{11}L_{21} & L_{11}L_{31} \\ L_{11}L_{21} & L_{21}^2 + L_{22}^2 & L_{21}L_{31} + L_{22}L_{32} \\ L_{11}L_{31} & L_{21}L_{31} + L_{22}L_{32} & L_{31}^2 + L_{32}^2 + L_{33}^2 \end{bmatrix}$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

$$L_{11} = \sqrt{4} = 2$$

$$L_{21} = -2 / L_{11} = -1$$

$$L_{31} = 2 / L_{11} = 1$$

$$L_{22} = \sqrt{2 - L_{21}^2} = 1$$

$$L_{32} = (-4 - L_{21}L_{31}) / L_{22} = -3$$

$$L_{33} = \sqrt{11 - L_{31}^2 - L_{32}^2} = 1$$

$$L = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & -3 & 1 \end{bmatrix}, \quad LL^T \text{ çarpımının hesabıyla sağlama yapılabılır.}$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Bant Matrisler ve Döndürme

Mühendislik problemleri genellikle seyrek doldurulmuş (sparse matrix) katsayı matrislerine yol açar, bu da matrisin çoğu elemanının sıfır olduğu anlamına gelir. Sıfır olmayan tüm elemanlar baş köşegen etrafında kümelenmişse bu matrisin bant olduğu söylenebilir. Bant matrise örnek olarak;

$$A = \begin{bmatrix} X & X & 0 & 0 & 0 \\ X & X & X & 0 & 0 \\ 0 & X & X & X & 0 \\ 0 & 0 & X & X & X \\ 0 & 0 & 0 & X & X \end{bmatrix}$$

Yukarıda gösterilen matris üç bant genişliğine sahiptir, çünkü her satırda (veya sütunda) en fazla üç sıfır olmayan eleman vardır. Böyle bir matris, tridiagonal olarak adlandırılır.

LU Ayrışımı (Decomposition)

Bir bant matris $A = LU$ formunda ayrıştırılırsa, L ve U'nun her ikisi de A'nın yapısını (bant) koruyacaktır. Örneğin yukarıdaki matris ayrıştırılırsa

$$L = \begin{bmatrix} X & 0 & 0 & 0 & 0 \\ X & X & 0 & 0 & 0 \\ 0 & X & X & 0 & 0 \\ 0 & 0 & X & X & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X & X \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} X & X & 0 & 0 & 0 \\ 0 & X & X & 0 & 0 \\ 0 & 0 & X & X & 0 \\ 0 & 0 & 0 & X & X \\ 0 & 0 & 0 & 0 & X \end{bmatrix}$$

Bir katsayı matrisinin bant yapısı, depolama ve hesaplama zamanından tasarruf etmek için kullanılabilir. Katsayı matrisi simetrik ise başka tasarruflar da mümkündür.

LU Ayrışımı (Decomposition)

Döndürme

Bzen denklemlerin çözüm algoritmasına sunulduğu sıra, sonuçlar üzerinde önemli bir etkiye sahiptir. Örneğin;

$$\begin{aligned}2x_1 - x_2 &= 1 \\-x_1 + 2x_2 - x_3 &= 0 \\-x_2 + x_3 &= 0\end{aligned}$$

Artırılmış katsayı matrisi:

$$[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 2 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 \end{array} \right]$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Denklemler Gauss eliminasyonu ya da LU ayrışımı ile $x_1 = x_2 = x_3 = 1$ doğru sonucunu elde etmede zorlanmayacağımıza anlamlı gelen ‘doğru sırada’dır. Şimdi birinci ve üçüncü denklemleri yer değiştirdiğimizi varsayıyalım, böylece artırılmış katsayı matrisi

$$[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 0 & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

Denklemleri değiştirmedigimiz için çözüm hala $x_1 = x_2 = x_3 = 1$ ‘dir. Bununla birlikte Gauss eliminasyonu sıfır elemanının varlığından dolayı başarısız olur.

Yukarıdaki örnek, eliminasyon aşamasında denklemleri yeniden sıralamanın bazen gereklili olduğunu göstermektedir.

LU Ayrışımı (Decomposition)

Pivot elemanı sıfır değil fakat aşağıdaki denklem grubundaki gibi pivot satırındaki diğer öğelere kıyasla çok küçükse yeniden sıralama veya satır döndürülmesi de gereklidir:

$$[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} \varepsilon & -1 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 0 & 1 \end{array} \right]$$

Gauss eliminasyonunun ilk aşamasından sonra artırılmış katsayı matrisi

$$[A'|b'] = \left[\begin{array}{ccc|c} \varepsilon & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 2 - \frac{1}{\varepsilon} & -1 + \frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & -1 + \frac{2}{\varepsilon} & -\frac{2}{\varepsilon} & 1 \end{array} \right]$$

LU Ayrışımı (Decomposition)

Bilgisayar sabit bir kelime uzunluğu ile çalıştığından tüm sayılar sonlu sayıda önemli bir sayıya yuvarlanır. Eğer ε çok küçükse, $1/\varepsilon$ çok büyütür ve $2 - (1/\varepsilon)$ gibi bir eleman $-1/\varepsilon$ 'a yuvarlanır. Bu nedenle

$$[A' | b'] = \left[\begin{array}{ccc|c} \varepsilon & -1 & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{\varepsilon} & \frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & \frac{2}{\varepsilon} & -\frac{2}{\varepsilon} & 1 \end{array} \right]$$

İkinci ve üçüncü denklemlerin birbiriyle açıkça çelişmesi nedeniyle çözüm süreci başarısız olur. Birinci ve ikinci ya da birinci ve üçüncü denklemler eliminasyondan önce değiştirilirse bu sorun ortaya çıkmaz.