Venujeme sa numerickým metódam riešenia lineárnych systémov rovníc

$$Ax = b$$

Základné delenie numerických metód

1. Priame metódy: Gaussova eliminačná metóda, LU-rozklad, LTL^T-rozklad, Choleského rozklad
2. Iteračné metódy: Jacobiho, Gaussova-Siedelova, metóda najväčšieho spádu, metóda združených smerov, metóda združených gradientov,

Gaussova eliminačná metóda a LU rozklad

Máme daný systém rovníc v maticovom tvare

$$Ax = b$$

kde $A \in M_{nn}(\mathbb{R})$ je reálna $n \times n$ matica, x a b sú stĺpcové vektory dĺžky n. Postupným použitím elementárnych riadkových operácií potom eliminujeme prvky matice pod diagonálou. V prvom kroku teda postupne odpočítavaním $\frac{a_{i1}}{a_{11}}$ násobku prvého riadku od i-teho ($i = 2, 3, \ldots, n$) vynulujeme prvky pod diagonálou v prvom stĺpci.

$$\underbrace{\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array}\right)}_{(A|b)} \overset{1.\ \text{krok}}{\sim} \underbrace{\left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array}\right)}_{(A^{(1)}|b^{(1)})}$$

Takto postupujeme aj v ďalších krokoch, teda v k-tom kroku odpočítavaním $m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}$ násobku k-teho riadku od i-teho ($i = k+1, k+2, \ldots, n$) vynulujeme prvky pod diagonálou v k-tom stĺpci. Po $n-1$ krokoch získame systém $(A^{(n-1)}|b^{(n-1)})$, kde $A^{(n-1)}$ je horná trojuholníková matica. Z tohoto systému hľadané riešenie x získame spätným dosadením

$$x_n = \frac{b_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}},\ x_{n-1} = \frac{b_{n-1}^{(n-2)} - a_{n-1\,n}^{(n-2)} x_n}{a_{n-1\,n-1}^{(n-2)}}, \ldots,$$

$$x_k = \frac{b_k^{(k-1)} - a_{k\,k+1}^{(k-1)} x_{k+1} - a_{k\,k+2}^{(k-1)} x_{k+2} - \cdots - a_{k\,n}^{(k-1)} x_n}{a_{kk}^{(k-1)}}$$

Operáciu pripočítania násobku jedného riadku matice k inému je možné reprezentovať maticovým násobením. Prenásobením matice A maticou

$$M_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & -m_{ik} & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

zľava dosiahneme odpočítanie m_{ik} násobku k-teho riadku matice A k i-temu riadku matice A. Ak teda máme maticu $A^{(k-1)}$ ktorá má nuly pod diagonálou v stĺpcoch 1 až $k-1$, k-ty stĺpec vynulujeme postupným násobením matice $A^{(k-1)}$ maticami M_{ik}, $i = k+1, \ldots, n$

$$A^{(k)} = M_{nk} M_{n-1\,k} \cdots M_{k+1\,k} A^{(k-1)}$$

Sučinom matíc $M_{nk} M_{n-1\,k} \cdots M_{k+1\,k}$ vznikne matica M_k, ktorá má 1 na diagonále a ktorej k-ty stĺpec je

$$m_k = (\underbrace{0 \ \cdots \ 0 \ 0}_{k} \ -m_{k+1\,k} \ \cdots \ -m_{nk})^T$$

Z matice A dostaneme potom hornú trojuholníkovú maticu $A^{(n-1)}$ nasledovne

$$A^{(n-1)} = M_{n-1} M_{n-2} \cdots M_2 M_1 A$$

Potom

$$A = M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-2}^{-1} M_{n-1}^{-1} A^{(n-1)}$$

Maticu M_k môžeme zapísať ako

$$M_k = I - m_k e_k^T,$$

kde e_k je vektor, ktorý má na k-tom mieste 1 a ostatné prvky nulové. Z výpočtu

$$(I - m_k e_k^T)(I + m_k e_k^T) = I - m_k e_k^T m_k e_k^T = I - m_k \cdot 0 \cdot e_k^T = I,$$

máme hneď

$$M_k^{-1} = (I - m_k e_k^T)^{-1} = I + m_k e_k^T.$$

Hneď aj vidíme, že $M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-2}^{-1} M_{n-1}^{-1}$ je dolná trojuholníková matica, ktorú označíme L. Naviac ak $l \leq k$

$$(I + m_l e_l^T)(I + m_k e_k^T) = I + m_l e_l^T + m_k e_k^T$$

preto

$$L = M_1^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1} = I + \sum_{k=1}^{n-1} m_k e_k^T$$

takže matica L obsahuje prvky m_{ik} na príslušných miestach pod diagonálou a 1 na diagonále. Dostaneme tak rozklad

$$A = LA^{(n-1)} = LU.$$

Na šetrenie pamäte, čo môže byť vhodné pri veľkých maticiach, je možné postupne prepisovať rozšírenú maticu $(A|b)$ tak, že prvkami pod diagonálou matice L prepíšeme prvky pod diagonálou matice A a horná trojuholníková časť matice U prepíše hornú trojuholníkovú časť matice A. Na záver možno vektor B prepísať vektrom riešenia. Týmto spôsobom vieme ušetriť pomerne veľa miesta, pretože namiesto alokovania miesta pre tri $n \times n$ matice stačí jedna $n \times n$ matica.

Praktický priebeh výpočtu si predvedieme na nasledovnom príklade.

Príklad: Nájdite LU rozklad matice

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ -4 & -3 & 3 & -9 \\ 6 & 1 & -4 & 1 \\ -2 & -3 & 9 & -2 \end{pmatrix}.$$

Princíp spočíva v postupnom dopĺňaní matíc L a U

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 & 0 \\ & & 1 & 0 \\ & & & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} & & & \\ 0 & & & \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}.$$

Keďže prvý riadok matice L poznáme, ľahko dopočítame prvý riadok matice U,

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ & 1 & 0 & 0 \\ & & 1 & 0 \\ & & & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & & & \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}.$$

Podobne vieme doplniť prvky v prvom stĺpci matice L

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & & 1 & 0 \\ -1 & & & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & & & \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}.$$

Teraz doplníme prvky v druhom riadku matice U. Druhý riadok matice L môže mať nenulové len prvé dva prvky. Takže zo znalosti matice A a spôsobu násobenia matíc máme

$$-2 \cdot 1 + u_{22} = -3 \qquad -2 \cdot (-1) + u_{23} = 3 \qquad (-2) \cdot 3 + u_{24} = -9.$$

z čoho ľahko spočítame druhý riadok matice U

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & & 1 & 0 \\ -1 & & & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}.$$

Následne dopočítame druhý stĺpec matice L zo vzťahov

$$3 \cdot 1 + (-1) \cdot l_{32} = 1 \qquad (-1) \cdot 1 + (-1) \cdot l_{42} = -3$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & & \\ 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}.$$

Pre tretí riadok matice U máme analogicky

$$3 \cdot (-1) + 2 \cdot 1 + u_{33} = -4 \qquad 3 \cdot 3 + 2 \cdot (-3) + u_{34} = 1$$

preto

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & -3 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}.$$

Podobne dopočítame prvky v treťom stĺpci L

$$(-1) \cdot (-1) + 2 \cdot 1 + (-3) \cdot l_{43} = 9$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & -3 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & \end{pmatrix}$$

a vo štvrtom riadku matice U

$$(-1) \cdot 3 + 2 \cdot (-3) + (-2) \cdot (-2) + u_{44} = -2$$

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 1 & 0 \\ -1 & 2 & -2 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & -1 & 3 \\ 0 & -1 & 1 & -3 \\ 0 & 0 & -3 & -2 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix}$$

Formalizáciu tohoto postupu dosiahneme rozpísaním $A = LU$ po prvkoch a uvedomením si tvaru matíc L a U. Potom pre $A = (a_{ij})$, $L = (l_{ij})$ a $U = (u_{ij})$ máme z $A = LU$

$$a_{ik} = \sum_{j=1}^{n} l_{ij} u_{jk}$$

a keďže pre $i < k$ je $l_{ik} = 0$ a pre $i > k$ je $u_{ik} = 0$ môžeme písať

$$a_{ik} = \sum_{j=1}^{\min\{i,k\}} l_{ij} u_{jk}$$

Potom pre prípady $i = 1$, $k = 1, \ldots, n$ a $k = 1$, $i = 1, \ldots, n$ máme postupne

$$a_{1k} = u_{1k} \qquad\qquad a_{i1} = l_{i1}u_{1k}$$

a následne pre $i = 2, \ldots, n$, keďže $l_{ii} = 1$

$$u_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}u_{jk},\ k = i, i+1, i+1, \ldots, n$$

a

$$l_{ki} = \frac{a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{kj}u_{ji}}{u_{ii}},\ k = i, i+1, i+1, \ldots, n$$

LU rozklad matice nemusí existovať. Napríklad vyššie uvedený postup pre maticu

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 7 \\ 3 & 5 & 3 \end{pmatrix}$$

zlyhá pri

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & & 1 \end{pmatrix} \qquad\qquad U = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & \end{pmatrix}$$

pretože rovnica pre l_{32} je

$$(6 =)3 \cdot 2 + l_{32} \cdot 0 = 5$$

Veta: Ak Existuje LU rozklad matice A, tak je jednoznačný.

Dôkaz. Jendoznačnosť dostaneme klasickým spôsobom nasledovnou úvahou. Ak $L_1U_1 = A = L_2U_2$ sú dva LU rozklady matice A, tak $L_2^{-1}L_1 = U_2U_1^{-1}$. Matica $L_2^{-1}L_1$ je dolná trojuholníková s jednotkami na diagonále, $U_2U_1^{-1}$ je horná trojuholníková. Keďže sa rovnajú, musia byť obidve rovné identickej matici $L_2^{-1}L_1 = I = U_2U_1^{-1}$. Z toho potom $L_1 = L_2$ a $U_1 = U_2$.

Jeden problém, keď proces LU rozkladu (a teda aj Gaussova eliminačná metóda) zlyhá sme už videli, konkrétne, keď v $k-1$ kroku je $u_{kk} = a_{kk}^{(k-1)} = 0$. Z toho vieme odvodiť podmienku existencie LU rozkladu: Ak všetky hlavné minory matice A sú nenulové, tak existuje LU rozklad.

Druhým problémom je numerická stabilita, čo si ilustrujeme na nasledovnom príklade:

Príklad: Riešme systém

$$\begin{aligned} -10^{-4}x + y &= 1 \\ x + y &= 2 \end{aligned}$$

Systém prepíšeme do maticového tvaru a upravíme Gaussovou eliminačnou metódou

$$\left(\begin{array}{cc|c} -10^{-4} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{cc|c} -10^{-4} & 1 & 1 \\ 0 & 10001 & 10002 \end{array}\right)$$

a spätnou substitúciou nájdeme

$$y = \frac{10002}{10001} \qquad\qquad x = \frac{10000}{10001}.$$

Toto je presné riešenie.

Ak však počítame v aritmetike s konečným počtom platných číslic môže nastať problém. Ak by sme napríklad v predošlej úlohe počítali s presnosťou na 3 platné číslice, tak $10000 + 1 = 10000$, $10000 + 2 = 10000$ a teda postup by vyzeral nasledovne

$$\left(\begin{array}{cc|c} -10^{-4} & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{array}\right) \sim \left(\begin{array}{cc|c} -10^{-4} & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{array}\right)$$

s riešením

$$y = 1 \qquad\qquad x = 0.$$

Gaussova eliminačná metóda slúži na riešenie systémov $Ax = b$. LU rozklad matice A je v princípe len iný zápis Gaussovej eliminačnej metódy. Ak poznáme LU rozklad, tak systém $Ax = b$ vieme prepísať na $LUx = b$ tento systém potom riešime tak, že najskôr nájdeme riešenie $Ly = b$ a následne riešenie $Ux = y$.

Videli sme, že LU rozklad a Gaussova eliminačná metóda pri použití na systém lineárnych rovníc je v princípe to isté. Je teda namieste otázka, prečo je dobré vôbec hľadať LU rozklad matice. Pokiaľ máme len jeden konkrétny systém, tak LU rozkladom naozaj nič nezískame. Avšak často sa stáva, že máme danú maticu systému A a rôzne pravé strany b_i a pre každé b_i chceme nájsť riešenie systému $Ax = b_i$. Časová zložitosť (t.j. počet operácii na výpočet) Gaussovej eliminačnej metódy pre maticu rozmeru $n \times n$ je $O(n^3)$ (presne $\frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{n}{3}$). Časová zložitosť pre výpočet riešenia $Ux = b$ alebo $Lx = b$, kde U je horná trojuholníková a L je dolná trojuholníková matica je v oboch prípadoch $O(n^2)$. Takže pri viacerých pravých stranách LU rozkladom ušetrím čas výpočtu.