Príklad: Použitie LU rozkladu.

Predpokladajme, že máme danú $n \times n$ maticu A a dva n-vektory c a d. Chceme vypočítať $s = c^T A^{-1} d$. Prvá možnosť, ktorá sa ponúka je spočítať maticu A^{-1} a následne vypočítať uvedený výraz. Ekonomickejší spôsob je ale použiť LU rozklad. Výraz $A^{-1}d$ vlastne znamená nájsť x také, že $Ax = d$, čiže riešiť systém. Postupovať teda môžeme tak, že spočítame rozklad $PA = LU$, nájdeme y také, že $Ly = Pd$ a nájdeme x také, že $Ux = y$. Následne spočítame $s = c^T x$.

Poznámka: A^{-1} vo výrazoch zvyčajne znamená 'nájdi riešenie systému' a len málokedy 'nájdi inverznú maticu'.

V predchádzajúcej časti sme videli problémy, ktoré môžu nastať pri Gaussovej eliminačnej metóde – ak v niektorom kroku vznikla 0 v ľavom hornom rohu príslušnej podmatice, nemohli sme pokračovať v GEM. A ak na diagonále bolo číslo blízke 0, pri GEM v spojení s aritmetikou s konečným počtom platných číslic mohlo dôjsť k podstatným chybám. Tieto problémy z veľkej časti rieši pivotovanie, t.j. výmena riadkov a stĺpcov matice, tak aby sme v príslušnom kroku v danej podmatici získali v ľavom hornom rohu vhodný prvok.

Je niekoľko typov pivotovania

1. Čiastočné pivotovanie s výberom najväčšieho prvku v stĺpci (riadku).

2. Úplné pivotovanie - výber najväčšieho prvku v príslušnej podmatici.

3. Vežové pivotovanie - výber najväčšieho prvku v príslušnom riadku alebo stĺpci (z šachovej terminológie veža=rook, rook pivoting).

Pozrieme sa najskôr na čiastočné pivotovanie s výberom prvku v stĺpci. Princíp spočíva v tom, že na začiatku kroku GEM vymeníme dva riadky tak, aby sme ako prvok v ľavom hornom rohu príslušnej podmatice dostali v absolútnej hodnote najväčší prvok v prvom stĺpci uvedenej podmatice. Tento postup je opäť výhodné zapísať pomocou matíc.

Výmenu dvoch (prípadne viacerých) riadkov matice A dosiahneme násobením matice A z ľava permutačnou maticou, t.j. maticou, ktorá vznikne z jednotkovej matice výmenou riadkov. Označme permutačnú maticu, ktorá vymieňa i-ty riadok za j-ty, $i < j$, ako Π_i. Potom postup GEM s čiastočným pivotovaním s výberom v stĺpci prebieha nasledovne:

$$M_{n-1}\Pi_{n-1} \cdots M_2\Pi_2 M_1 \Pi_1 A = A^{(n-1)} = U \tag{1}$$

pričom $M_k = I - m_k e_k^T$. Pozrime sa, ako možno (1) upraviť ako LU rozklad.

Súčin matíc na ľavej strane (1) môžeme prepísať nasledovne

$$\cdots (\Pi_{n-1} \cdots \Pi_3 M_2 \Pi_3 \cdots \Pi_{n-1})(\Pi_{n-1} \cdots \Pi_2 M_1 \Pi_2 \cdots \Pi_{n-1})(\Pi_{n-1} \cdots \Pi_1) A \tag{2}$$

Označme $\hat{M}_k = \Pi_{n-1} \cdots \Pi_{k+1} M_k \Pi_{k+1} \cdots \Pi_{n-1}$. Potom

$$\begin{aligned}
\hat{M}_k &= \Pi_{n-1} \cdots \Pi_{k+1} M_k \Pi_{k+1} \cdots \Pi_{n-1} \\
&= \Pi_{n-1} \cdots \Pi_{k+1} (I - m_k e_k^T) \Pi_{k+1} \cdots \Pi_{n-1} \\
&= I - \Pi_{n-1} \cdots \Pi_{k+1} m_k e_k^T \Pi_{k+1} \cdots \Pi_{n-1}.
\end{aligned}$$

Keď si uvedomíme, že $e_k^T \Pi_{k+1} \cdots \Pi_{n-1}$ znamená permutáciu $k+1$-ho až $n-1$-ho prvku vektora e_k^T, čo sú ale 0, tak $e_k^T \Pi_{k+1} \cdots \Pi_{n-1} = e_k^T$. Podobne $\Pi_{n-1} \cdots \Pi_{k+1} m_k$ je vektor, ktorý dostaneme nejakou permutáciou $k+1$-ho až $n-1$-ho prvku vektora m_k, a teda prvých k-súradníc tohoto vektora bude stále rovných 0. Označme preto $\hat{m}_k = \Pi_{n-1} \cdots \Pi_{k+1} m_k$, z čoho dostávame, že

$$\hat{M}_k = I - \hat{m}_k e_k^T$$

je dolná trojuholníková matica, ktorá vznikne z matice M_k permutovaním prvkov v k-tom stĺpci pod hlavnou diagonálou. V každom prípade (2) prejde na tvar

$$\hat{M}_{n-1} \cdots \hat{M}_1 (\Pi_{n-1} \cdots \Pi_1) A = U$$

a po preznačení $P = \Pi_{n-1} \cdots \Pi_1$ a $(\hat{M}_{n-1} \cdots \hat{M}_1)^{-1} = L$ dostaneme LU rozklad s čiastočným pivotovaním s výberom hlavného prvku v stĺpci

$$PA = LU$$

Príklad: Nájdite LU rozklad matice s čiastočným pivotovaním v stĺpci

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & -1 & 2 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & 2 & 0 \\ 1 & 3 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

Riešenie: Budeme počítať GEM hornú trojuholníkovú maticu, pričom multiplikátory m_k budeme zapisovať pod hlavnú diagonálu namiesto núl. Zaroveň si budeme zapisovať transpozície pre príslušné výmeny riadkov.

V prvom kroku teda najskôr nájdeme v absolútnej hodnote najväčší prvok v prvom stĺpci, čo je 2 v treťom riadku, a preto vymeníme prvý a tretí riadok, takže $\Pi_1 = (1\,3)$.

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & 2 \\ 1 & 3 & 2 & -1 \end{pmatrix}$$

Multiplikátory m_{i1} sú po rade 0, 1/2, 1/2, takže maticu upravíme GEM a miesto núl v prvom stĺpci zapíšeme tieto multiplikátory

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \\ 1/2 & 1 & -2 & 2 \\ 1/2 & 3 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

V druhom kroku pokračujeme s hlavnou 3×3 podmaticou. Najväčší prvok v druhom stĺpci je 3 zo štvrtého riadku, takže vymeníme druhý a štvrtý riadok $\Pi_2 = (24)$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 1/2 & 3 & 1 & -1 \\ 1/2 & 1 & -2 & 2 \\ 0 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

a použijeme GEM na 3×3 podmaticu (pozor, prvky prvého stĺpca neupravujeme, tam sú v skutočnosti 0). Multiplikátory m_{i2} sú po rade $1/3$ a $2/3$ a po úprave dostaneme

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 1/2 & 3 & 1 & -1 \\ 1/2 & 1/3 & -7/3 & 7/3 \\ 0 & 2/3 & -2/3 & 5/3 \end{pmatrix}$$

V treťom, poslednom kroku riadky nemeníme, lebo $|-7/3| > |-2/3|$. Multiplikátor je $m_{i3} = (-2/3)/(-7/3) = 2/7$ a poslednou GEM dostaneme

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 1/2 & 3 & 1 & -1 \\ 1/2 & 1/3 & -7/3 & 7/3 \\ 0 & 2/3 & 2/7 & 1 \end{pmatrix}$$

Z toho potom máme

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 1/3 & 1 & 0 \\ 0 & 2/3 & 2/7 & 1 \end{pmatrix} \qquad U = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 3 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & -7/3 & 7/3 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Permutácia $P = (24)(13)$ vznikne z I postupnou výmenou riadkov 1–3 a 2–4,

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Tým sme získali hľadaný LU rozklad.

Ak máme LU rozklad s čiastočným pivotovaním matice A a potrebujeme nájsť riešenie systému $Ax = b$, rozpíšeme $PAx = LUx = Pb$. Najskôr teda nájdeme y také, že $Ly = Pb$ a potom x je riešením systému $Ux = y$.

Poznámky:

1. LU rozklad s čiastočným pivotovaním regulárnej matice A vždy existuje.
2. Prvky matice L sú v absolútnej hodnote nanajvýš 1.
3. Dá sa teoreticky ukázať, že aj GEM s čiastočným pivotovaním je nestabilná metóda. Avšak v praktických úlohách sa nestabilita tejto metódy prejavuje veľmi zriedka, preto ju z praktického hľadiska považujeme za stabilnú.

Prípad úplného pivotovania už teraz predstavíme veľmi rýchlo. V k-tom kroku nájdeme najväčší prvok príslušnej hlavnej podmatice a výmenou riadka a stĺpca ho presunieme do ľavého horného rohu. Následne eliminujeme prvky v určenom stĺpci pod hlavnou diagonálou. Takže maticovo môžeme postup zapísať ako

$$M_{n-1}\Pi_{n-1} \cdots M_1\Pi_1 A \Gamma_1 \cdots \Gamma_{n-1} = U.$$

Z toho podobnými úvahami ako v prípade čiastočného pivotovania dostaneme rozklad

$$PAQ^T = LU.$$

Riešenie rovnice $Ax = b$ potom prebieha nasledovne:

1. Nájsť riešenie $Lz = Pb$ s neznámou z.
2. Nájsť riešenie $Uy = z$ s neznámou y.
3. Spočítať $x = Q^T y$.

GEM s úplným pivotovaním už možno považovať za stabilnú metódu avšak vzhľadom na zriedkavú nestabilitu GEM s čiastočným pivotovaním sa často nevyužíva aj vzhľadom na veľký počet operácií porovnávania.

Medzi novšie metódy patrí GEM s vežovým pivotovaním. Postup pri tomto pivotovaní je nasledovný. V k-tom kroku GEM v príslušnej hlavnej podmatici nájdeme prvok s najväščou absolútnou hodnotou v prvom stĺpci tejto podmatice a následne zistíme, či je tento prvok aj najväčší v tom riadku v ktorom leží. Ak je, stane sa pivotom. Ak nie, vezmeme najväčší prvok z toho istého riadka a zistíme, či je najväčší aj v stĺpci, v ktorom leží. Ak áno, stane sa pivotom, ak nie, vezmeme najväčší prvok z toho stĺpca a zistíme, či je najväčší aj v riadku v ktorom leží,....

Tento postup nakoniec nájde nejaký pivot.

Výhodou tejto metódy je, že počet porovnaní, kým nájdeme pivot býva zvyčajne omnoho menší ako počet porovnaní pre GEM s úplným pivotovaním, ale napriek tomu má táto metóda porovnateľnú numerickú stabilitu ako GEM s úplným pivotovaním.

V tomto prípade dostávame tiež rozklad

$$PAQ^T = LU$$

pretože po nájdení pivota musíme zvyčajne meniť riadok aj stĺpec.

V prípade nedourčených systémov, t.j. systémov s maticou A s počtom riadkov menším ako počet stĺpcov a plnou hodnosťou je zrejme možné spočítať LU rozklad (s úplným alebo vežovým pivotovaním) v tvare

$$PAQ^T = L[U_1|U_2]$$

kde P a Q sú permutácie, L je dolná trojuholníková matica a U_1 je regulárna, horná trojuholníková.

Ak by sme chceli nájsť nejaké riešenie takého systému (ktorých je samozrejme nekonečne veľa), môžeme postupovať nasledovne. Zo systému $Ax = b$ dostaneme

$$(PAQ^T)(Qx) = Pb \Rightarrow L[U_1|U_2](Qx) = Pb$$

Vektor Qx napíšme ako $[z_1|z_2]^T$. Potom

$$L[U_1|U_2](Qx) = Pb \Rightarrow L[U_1|U_2][z_1|z_2]^T = Pb \Rightarrow L(U_1 z_1 + U_2 z_2) = Pb$$

Potom riešenie nájdeme nasledovne

1. Riešme $Ly = Pb$ s neznámou y.

2. Zvoľme z_2 a riešme $U_1 z_1 = y - U_2 z_2$ s neznámou z_1.

3. Položme $x = Q^T [z_1, z_2]^T$.

Symetrické matice

Pri aplikácii GEM na symetrické matice si môžeme všimnúť, že po vynulovaní k-teho stĺpca v k-tom kroku zvyšná hlavná podmatica zostáva symetrická a navyše v LU rozklade sú prvky v k-tom riadku matice U napravo od diagonály násobkami prvkov v k-tom stĺpci matice L pod diagonálou.

Veta. (LDL^T rozklad)
Nech A je $n \times n$ regulárna matica, taká, že každá jej hlavná $k \times k$ podmatica je regulárna. Potom existuje dolná trojuholníková matica L s jednotkami na diagonále a diagonálna matica $D = \mathrm{diag}(d_1, \ldots, d_m)$ taká, že

$$A = LDL^T,$$

Pričom tento rozklad je jednoznačný.

Dôkaz. Z daného predpokladu dostávame, že existuje LU rozklad matice A, $A = LU$. Tento rozklad môžeme upraviť nasledovne

$$L^{-1} A L^{-T} = U L^{-T}.$$

Na ľavej strane rovnosti je symetrická matica, na pravej strane je horná trojuholníková matica, takže táto matica musí byť diagonálna, preto

$$U L^{-T} = D \Rightarrow U = DL^T.$$

Z jednoznačnosti LU rozkladu potom dostávame jednoznačnosť LDL^T rozkladu.

Systém $Ax = b$ potom riešime v troch krokoch: $Ax = LDL^T x = b$

1. $Lz = b$

2. $Dy = z$

3. $L^T x = y$.

Pokiaľ by sme chceli použiť čiastočné pivotovanie, porušíme symetriu. Ak by sme teda pri výmenách riadkov zachovať symetriu, musíme meniť aj príslušné stĺpce, čo však spôsobí, že na mieste pivota môže byť len prvok z diagonály. Prvky na diagonále však môžu byť všetky nulové aj pri regulárnej matici, ako ukazuje príklad

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

V prípade kladne definitných matíc však môžeme použiť nasledovný fakt

Veta. Ak symetrická matica A je kladne definitná, tak všetky jej hlavné podmatice získané pri GEM sú kladne definitné.

Dôkaz. Vezmime kladne definitnú symetrickú maticu

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a^T \\ a & B \end{pmatrix}.$$

Po prvom kroku GEM získame maticu

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a^T \\ 0 & B - \frac{1}{a_{11}} a a^T \end{pmatrix}.$$

Vezmime ľubovoľný nenulový vektor z tvaru $z = (x|y^T)^T$ kde $x \in \mathbb{R}$ a y je $n-1$-vektor. Potom z kladnej definitnosti matice A máme

$$0 < z^T A z = x^2 a_{11} + 2a^T y x + y^T B y$$

Po úprave GEM pre príslušnú podmaticu máme

$$y^T \left(B - \frac{aa^T}{a_{11}} \right) y = y^T B y - \frac{(a^T y)^2}{a_{11}}$$

Potom môžeme odhadnúť

$$y^T B y - \frac{(a^T y)^2}{a_{11}} > -\frac{(a^T y)^2}{a_{11}} - x^2 a_{11} - 2a^T y x = -\frac{1}{a_{11}} \left(a_{11} x + a^T y \right)^2$$

Táto nerovnosť platí pre ľubovoľné x, teda aj pre $x = -\frac{a^T y}{a_{11}}$, pre ktoré je výraz n zátvorke rovný 0. T.j. $B - \frac{aa^T}{a_{11}}$ je kladne definitná. Ďalej indukcia.

Vďaka tejto vete vieme, že v diagonálnej matici D sú všetky prvky na diagonále kladné. Môžeme preto D odmocniť, $D = \sqrt{D}\sqrt{D}$ a prepísať

$$A = LDL^T = L\sqrt{D}\sqrt{D}L^T = \bar{L}\bar{L}^T$$

Tým dostávame nový typ rozkladu pre symetrické kladne definitné matice, ktorý voláme Choleského rozklad symetrickej kladne definitnej matice A.

$$A = \bar{L}\bar{L}^T$$