

LU rozklad a jeho numerická analýza

Úvod

- Necht A je regulární matice. Řešíme

$$Ax = b.$$

- Gaussova eliminace (LU rozklad)
→ **jeden z nejdůležitějších nástrojů** pro řešení.
- Moderní algoritmy → Gaussova eliminace + teorie grafů, kombinatorika, heuristiky pro omezení zaplnění, teorie citlivosti a numerické stability.
- Historický úvod a souvislosti – skriptá.

Maticový popis Gaussovy eliminace

Eliminační matice

Uvažujme čtvercovou $n \times n$ matici M_k následující struktury

$$M_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & m_{k+1,k} & 1 & \\ & & & \vdots & & \ddots \\ & & & m_{n,k} & & 1 \end{bmatrix}, \quad m_k = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ m_{k+1,k} \\ \vdots \\ m_{n,k} \end{bmatrix}.$$

- Platí

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

- Cvičení:

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

Maticový popis Gaussovy eliminace

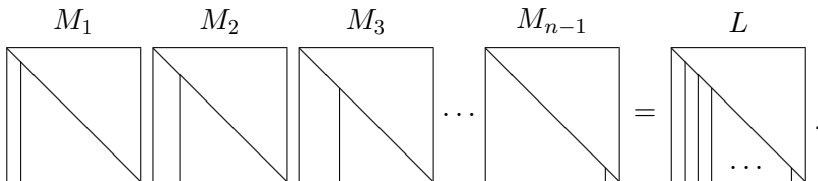
Součin eliminačních matic

- Uvažujme dále dolní trojúhelníkovou matici L ,

$$L \equiv M_1 M_2 M_3 \dots M_{n-1}.$$

- Na cvičení ukážeme, že platí

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



Soustava lineárních rovnic

Předpoklad proveditelnosti Gaussovy eliminace

- Uvažujme

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{C}^{n \times n}, \quad b \in \mathbb{C}^n$$

s regulární maticí A .

- V následujícím předpoklad: **Gaussovu eliminaci lze provést.**

Gaussova eliminace

První krok

Od i -tého řádku odečteme $(a_{i,1}/a_{1,1})$ násobek prvního řádku, $i = 2, \dots, n$. Dostaneme tak matici $A^{(1)}$,

$$A \longrightarrow A^{(1)} \equiv \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ 0 & a_{2,2}^{(1)} & \cdots & a_{2,n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(1)} & \cdots & a_{n,n}^{(1)} \end{bmatrix} = M_1^{-1} A,$$

$$M_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -a_{2,1}/a_{1,1} & 1 & & & \\ -a_{3,1}/a_{1,1} & & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -a_{n,1}/a_{1,1} & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad m_1 \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ a_{2,1}/a_{1,1} \\ a_{3,1}/a_{1,1} \\ \vdots \\ a_{n,1}/a_{1,1} \end{bmatrix}.$$

Gaussova eliminace

První krok - popis

- Platí

$$M_1^{-1} = I - m_1 e_1^T, \quad m_1 \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ a_{2,1}/a_{1,1} \\ a_{3,1}/a_{1,1} \\ \vdots \\ a_{n,1}/a_{1,1} \end{bmatrix}.$$

- Prvkům $a_{i,1}/a_{1,1}$ budeme říkat **násobitelé**.
- $M_1^{-1}Ax = M_1^{-1}b \dots$ modifikujeme i pravou stranu

$$b \longrightarrow b^{(1)} \equiv M_1^{-1}b.$$

Gaussova eliminace

Druhý krok

- V druhém kroku eliminujeme poddiagonální prvky **druhého sloupce** matice $A^{(1)}$ užitím druhého řádku této matice.
- Dostaneme $A^{(2)} \equiv M_2^{-1}A^{(1)}$, kde $M_2^{-1} = I - m_2 e_2^T$

$$M_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & 1 & & & \\ & -a_{3,2}^{(1)}/a_{2,2}^{(1)} & 1 & & \\ & \vdots & & \ddots & \\ & -a_{n,2}^{(1)}/a_{2,2}^{(1)} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad m_2 \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ a_{3,2}^{(1)}/a_{2,2}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n,2}^{(1)}/a_{2,2}^{(1)} \end{bmatrix}.$$

Gaussova eliminace

Po $n - 1$ krocích

- Po $n - 1$ krocích dostaneme horní trojúhelníkovou matici

$$U \equiv A^{(n-1)} = M_{n-1}^{-1} (M_{n-2}^{-1} (\dots (M_2^{-1} (\underbrace{M_1^{-1} A}_{=A^{(1)}}) \dots)) \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{=A^{(2)}} \underbrace{\hspace{1.5cm}}_{\vdots}).$$

- Zavedeme-li označení $A^{(0)} \equiv A$, platí

$$U = \begin{bmatrix} a_{1,1}^{(0)} & a_{1,2}^{(0)} & a_{1,3}^{(0)} & \cdots & a_{1,n}^{(0)} \\ & a_{2,2}^{(1)} & a_{2,3}^{(1)} & \cdots & a_{2,n}^{(1)} \\ & & a_{3,3}^{(2)} & \cdots & a_{3,n}^{(2)} \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & a_{n,n}^{(n-1)} \end{bmatrix}.$$

Gaussova eliminace a LU rozklad

$$A = (M_1 M_2 \dots M_{n-2} M_{n-1}) U \equiv LU ,$$

kde L je dolní trojúhelníková matice s jednotkovou diagonálou

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ a_{2,1}^{(0)}/a_{1,1}^{(0)} & 1 & & & & \\ a_{3,1}^{(0)}/a_{1,1}^{(0)} & a_{3,2}^{(1)}/a_{2,2}^{(1)} & 1 & & & \\ a_{4,1}^{(0)}/a_{1,1}^{(0)} & a_{4,2}^{(1)}/a_{2,2}^{(1)} & a_{4,3}^{(2)}/a_{3,3}^{(2)} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & 1 & \\ a_{n,1}^{(0)}/a_{1,1}^{(0)} & a_{n,2}^{(1)}/a_{2,2}^{(1)} & a_{n,3}^{(2)}/a_{3,3}^{(2)} & & a_{n,n-1}^{(n-2)}/a_{n-1,n-1}^{(n-2)} & 1 \end{bmatrix} .$$

LU rozklad

a řešení $Ax = b$

- Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je regulární matice. Rozklad tvaru

$$A = LU,$$

kde L je dolní trojúhelníková s jednotkovou diagonálou a U je horní trojúhelníková matice, nazveme **LU rozkladem** A .

- $Ax = b$ vyřešíme pomocí LU rozkladu **ve dvou krocích**.

- ① **Přímý chod**: Implicitní násobení $Ax = b$ maticí L^{-1} ,

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad L^{-1}Ax = L^{-1}b \quad \Leftrightarrow \quad Ux = b^{(n-1)}.$$

- ② **Zpětný chod**: Řešení soustavy

$$Ux = b^{(n-1)}$$

s horní trojúhelníkovou maticí U .

Přímý chod Gaussovy eliminace

Přímý chod

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad L^{-1}Ax = L^{-1}b \quad \Leftrightarrow \quad Ux = b^{(n-1)}.$$

```
input  $A^{(0)} := A = [a_{i,j}]$ ,  $b^{(0)} := b = [\beta_1, \dots, \beta_n]^T$   
for  $k = 1 : n - 1$  do  
  for  $i = k + 1 : n$  do  
     $m_{i,k} := \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}$   
    for  $j = k + 1 : n$  do  
       $a_{i,j}^{(k)} := a_{i,j}^{(k-1)} - m_{i,k} a_{k,j}^{(k-1)}$   
    end for  
     $\beta_i^{(k)} := \beta_i^{(k-1)} - m_{i,k} \beta_k^{(k-1)}$   
  end for  
end for
```

Zpětný chod Gaussovy eliminace

Zpětný chod

Řešení soustavy

$$Ux = b^{(n-1)}$$

s horní trojúhelníkovou maticí $U = A^{(n-1)}$.

```
input  $A^{(n-1)}, b^{(n-1)}$   
 $\xi_n := \beta_n^{(n-1)} / a_{n,n}^{(n-1)}$   
for  $i = n - 1 : -1 : 1$  do  
   $\xi_i := \beta_i^{(n-1)}$   
  for  $j = i + 1 : n$  do  
     $\xi_i := \xi_i - a_{i,j}^{(i-1)} \xi_j$   
  end for  
   $\xi_i := \xi_i / a_{i,i}^{(i-1)}$   
end for
```

Praktická realizace

Přepis prvků matice

- Nuly v $A^{(k)}$ se fyzicky přepisují nově spočtenými prvky.
- Po výpočtu:

$$A \longrightarrow \begin{array}{|c|} \hline \begin{array}{c} \diagup \\ L \end{array} \\ \hline \end{array} \begin{array}{c} U \\ \diagdown \end{array} .$$

- Máme $A = LU$, řešíme dvě trojúhelníkové soustavy

$$L(Ux) = b, \quad Ux = L^{-1}b,$$

přičemž řešení první soustavy $L^{-1}b = b^{(n-1)}$ je vypočteno v průběhu vytvoření LU rozkladu.

Gaussova eliminace s částečnou pivotací

Silná regularita

- V předchozím předpoklad

$$a_{k,k}^{(k-1)} \neq 0 \quad \text{pro} \quad k = 1, \dots, n-1.$$

Věta: Proveditelnost Gaussovy eliminace

Podmínka $a_{k,k}^{(k-1)} \neq 0$, $k = 1, \dots, n-1$ je splněna právě tehdy, je-li matice A **silně regulární**, tj. pokud platí

$$\det \begin{bmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k,1} & \cdots & a_{k,k} \end{bmatrix} \neq 0, \quad k = 1 \dots, n$$

(všechny hlavní minory jsou nenulové).



Prostá Gaussova eliminace

Úvahy o numerické stabilitě

- Předpoklad **silné regularity** → **nedojde k dělení nulou**, nemusí být splněn,

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

- Pozor na
 - **mezivýsledky s velkou absolutní hodnotou**,
 - **odečítání čísel stejného znaménka**.→ ztráta přesnosti, numerická nestabilita.
- Kde mohou v algoritmu vznikat velká čísla?

Výpočetní operace - jádro Gaussovy eliminace

Kde mohou v algoritmu vznikat velká čísla?

- **Jádrem** Gaussovy eliminace je

$$m_{i,k} = \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}, \quad a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(k-1)} - m_{i,k} a_{k,j}^{(k-1)},$$

kde $i, j \in \{k+1, \dots, n\}$, $k = 1, \dots, n-1$.

- Je-li **dělitel** $a_{k,k}^{(k-1)}$ **výrazně menší** v porovnání s čitateli $a_{i,k}^{(k-1)}$, potom je $|m_{i,k}| \gg 1$. Může se pak např. stát, že

$$|m_{i,k} a_{k,j}^{(k-1)}| \gg |a_{i,j}^{(k-1)}|, \quad \text{a tedy} \quad |a_{i,j}^{(k)}| \gg |a_{i,j}^{(k-1)}|.$$

- V praxi je **třeba řešit soustavy s obecnou regulární maticí** bez předpokladu silné regularity.

Jak omezit vliv zaokrouhlovacích chyb?

Věta

Ke každé regulární A existuje permutační matice P taková, že PA je silně regulární. Matice P není obecně určena jednoznačně.

- Naučíme se konstruovat permutační matici P zajišťující nejen **silnou regularitu** PA , ale i **zlepšení numerické stability**.
- Při řešení soustavy rovnic **nezáleží na pořadí** rovnic.
- Snaha, aby $m_{i,k}$ v absolutní hodnotě **co nejmenší**,

$$m_{i,k} = \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}.$$

Gaussova eliminace s částečnou pivotací

Strategie

- Najdeme index ℓ takový, aby

$$\left| a_{\ell,k}^{(k-1)} \right| = \max_{i=k,\dots,n} \left| a_{i,k}^{(k-1)} \right|.$$

- Zaměníme k -tý a ℓ -tý řádek v matici $A^{(k-1)}$ a pokračujeme standardním postupem.
- Výběr maximálního prvku ve sloupci $\rightarrow$ všechny **násobitelé** jsou v absolutní hodnotě **menší nebo rovny jedné**.

Gaussova eliminace s částečnou pivotací

Maticový zápis

Věta

Ke každé regulární A existuje permutační matice P taková, že PA je silně regulární. Matice P není obecně určena jednoznačně.

- Pro dokončení důkazu věty stačí ukázat
 - Na **GE s částečnou pivotací** aplikovanou na A lze nahlížet
 - jako na **prostou GE** aplikovanou na PA .
- P_k značí permutační matici, která v k -tém kroku eliminace **zamění k -tý a ℓ -tý řádek**. Celý proces lze zapsat jako

$$U \equiv M_{n-1}^{-1} \left(P_{n-1} \dots (M_2^{-1} (P_2 (M_1^{-1} (P_1 A)))) \right).$$

Gaussova eliminace s částečnou pivotací

Maticový zápis

- Řešení soustavy $Ax = b$ pak dostaneme vyřešením úlohy

$$Ux = M_{n-1}^{-1} \left(P_{n-1} \dots (M_2^{-1} (P_2 (M_1^{-1} (P_1 b)))) \right),$$

kde U je horní trojúhelníková matice.

- Uvědomme si, že matice

$$M_{n-1}^{-1} P_{n-1} \dots M_2^{-1} P_2 M_1^{-1} P_1,$$

která převede matici A na horní trojúhelníkový tvar **není obecně dolní trojúhelníková**.

- Lze Gaussovu eliminaci s částečným výběrem pivota popsat jako LU rozklad?

Struktura matic $P_t M_k^{-1} P_t$, $t > k$

- Matice

$$P_t M_k^{-1} P_t, \quad t > k$$

má stejnou nenulovou strukturu jako M_k^{-1} 

- První krok lze zapsat ve tvaru

$$P_2 M_1^{-1} P_1 A = (P_2 M_1^{-1} P_2) P_2 P_1 A$$

a $P_2 M_1^{-1} P_2$ má stejnou nenulovou strukturu jako M_1^{-1} .

Oddělení eliminačních a permutačních matic

- Analogicky

$$\begin{aligned} U &= M_{n-1}^{-1} P_{n-1} M_{n-2}^{-1} P_{n-2} \dots P_2 M_1^{-1} P_1 A \\ &= \left(\tilde{M}_{n-1}^{-1} \tilde{M}_{n-2}^{-1} \dots \tilde{M}_1^{-1} \right) (P_{n-1} P_{n-2} \dots P_2 P_1) A, \end{aligned}$$

kde

$$\begin{aligned} \tilde{M}_{n-1}^{-1} &= M_{n-1}^{-1} \\ \tilde{M}_{n-2}^{-1} &= P_{n-1} M_{n-2}^{-1} P_{n-1} \\ &\vdots \\ \tilde{M}_1^{-1} &= (P_{n-1} P_{n-2} \dots P_3 P_2) M_1^{-1} (P_2 P_3 \dots P_{n-2} P_{n-1}). \end{aligned}$$

- Matice A je nejprve permutována, poté eliminována.
- Označme

$$\begin{aligned} L^{-1} &= \tilde{M}_{n-1}^{-1} \tilde{M}_{n-2}^{-1} \dots \tilde{M}_1^{-1}, \\ P &= P_{n-1} P_{n-2} \dots P_2 P_1. \end{aligned}$$

Zápis eliminace s částečnou pivotací jako LU rozklad

- Potom platí

$$U = L^{-1}PA, \quad \text{neboli} \quad LU = PA$$

je zápis eliminace s částečnou pivotací jako LU rozklad.

- Z konstrukce $\rightarrow$ **daný rozklad vždy existuje**; pro libovolnou regulární matici A je tedy matice PA silně regulární.
- Matici P **nelze určit apriori** (předem), vzniká postupně při výběru jednotlivých pivotů.
- Díky výběru pivota $\rightarrow$ prvky $|L|$ jsou ≤ 1 .

Věta

GE s částečnou pivotací lze reprezentovat vztahem $PA = LU$.

Jinak řečeno, na GE s částečnou pivotací lze nahlížet jako na GE bez pivotace aplikovanou na permutovanou matici PA .

Citlivost $Ax = b$ na změny vstupních dat

- Prvky A lze např. v některých případech interpretovat jako hodnoty spojené s popisem **modelu** a prvky b jako hodnoty spojené s **pozorováním**.
- V měřených datech chyby $\rightarrow$ je přirozené zkoumat vliv malých změn vstupních dat (malých **perturbací** dat) na řešení x .
- Nechť Δb označuje malou změnu pravé strany a nechť $x + \Delta x$ je řešením systému s perturbovanou pravou stranou

$$A(x + \Delta x) = b + \Delta b.$$

- Jak může velikost Δb ovlivnit velikost Δx ?
- Platí

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}.$$



Kvalita aproximace a norma rezidua

- Mějme aproximaci $\hat{x}$ přesného řešení x .
Jak blízko je aproximace $\hat{x}$ k řešení přesnému řešení x ?
- Nabízí se spočít **reziduum** $b - A\hat{x}$ a na základě jeho velikosti (normy) usuzovat na blízkost $\hat{x}$ k řešení.
- Přepíšeme-li $r = b - A\hat{x}$ ve tvaru

$$A(x + \underbrace{(\hat{x} - x)}_{\Delta x}) = b + \underbrace{(-r)}_{\Delta b},$$

plyne z předchozího

$$\frac{\|x - \hat{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|r\|}{\|b\|}.$$

- Je-li $\kappa(A)$ velké, **nemusí** relativní **norma rezidua** **poskytovat relevantní informaci** o blízkosti aproximace $\hat{x}$ k x .

Numerická stabilita Gaussovy eliminace

Výsledky Goldstine, von Neumanna, Wilkinsona a ostatních

Goldstine, von Neumanna 1947: Pro inverzi X symetrické poz. def. matice A spočtenou Gaussovou eliminací platí

$$\|AX - I\| \leq 14.2 n^2 \mathbf{u} \kappa(A),$$

kde $\mathbf{u}$ označuje strojovou přesnost.

Wilkinson a ostatní (1961-1971)

Nechť $\hat{L}$ a $\hat{U}$ jsou vypočtené faktory LU rozkladu matice A a nechť $\hat{x}$ je vypočtené řešení úlohy $Ax = b$ s použitím LU rozkladu. Pak $\hat{x}$ je přesným řešením úlohy

$$\begin{aligned}(A + \Delta A)\hat{x} &= b, \\ |\Delta A| &\leq 6 n \mathbf{u} |\hat{L}| |\hat{U}| + \mathcal{O}(\mathbf{u}^2), \\ \|\Delta A\|_{\infty} &\leq 6 n \mathbf{u} \|\hat{L}\|_{\infty} \|\hat{U}\|_{\infty} + \mathcal{O}(\mathbf{u}^2).\end{aligned}$$

Gaussova eliminace s částečnou pivotací

a zpětná stabilita

- Na GE s částečnou pivotací lze hledět jako na GE bez pivotace aplikovanou na matici PA - lze aplikovat předchozí větu.
- Kdy je podíl $\|\Delta A\|_\infty / \|A\|_\infty$ úměrný násobku $\mathbf{u}$?
- Částečná pivotace zajišťuje, že prvky matice $|\hat{L}|$ jsou vždy menší nebo rovny jedné, a proto je

$$\|\hat{L}\|_\infty \leq n.$$

- Potom je

$$\frac{\|\Delta A\|_\infty}{\|A\|_\infty} \leq 6n^2 \mathbf{u} \frac{\|\hat{U}\|_\infty}{\|A\|_\infty} + \mathcal{O}(\mathbf{u}^2).$$

- O zpětné stabilitě rozhoduje velikost **růstového faktoru**

$$\frac{\|\hat{U}\|_\infty}{\|A\|_\infty}.$$

Růstový faktor

a zpětná stabilita Gaussovy eliminace s částečnou pivotací

- Výpočet pomocí Gaussovy eliminace s částečnou pivotací je zpětně stabilní, pokud příliš neroste velikost prvků ve spočtené matici $\hat{U}$ v porovnání s velikostí prvků v původní matici A .
- Říkáme, že Gaussova eliminace s částečnou pivotací je **podmíněně zpětně stabilní**.

Maximální velikost růstového faktoru

v Gaussově eliminaci s částečnou pivotací

- Vyjdeme ze vztahu

$$m_{i,k} = \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{a_{k,k}^{(k-1)}}, \quad a_{i,j}^{(k)} = a_{i,j}^{(k-1)} - m_{i,k} a_{k,j}^{(k-1)}.$$

- Jelikož $|m_{i,k}| \leq 1$, platí

$$\begin{aligned} |a_{i,j}^{(k)}| &\leq |a_{i,j}^{(k-1)}| + |a_{k,j}^{(k-1)}| \\ &\leq 2 \max_{i,j} |a_{i,j}^{(k-1)}| \\ &\vdots \\ &\leq 2^{k-1} \max_{i,j} |a_{i,j}| \end{aligned}$$

a prvky matice U splňují nerovnost

$$|u_{ij}| \leq 2^{n-1} \max_{i,j} |a_{i,j}|.$$

Maximální velikost růstového faktoru

Příklad

- Maximální nárůst velikosti prvků U lze pozorovat při Gaussově eliminaci s částečnou pivotací např. u matice (cvičení)

$$\begin{bmatrix} 1 & & & & 1 \\ -1 & 1 & & & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ -1 & \cdots & -1 & 1 & 1 \\ -1 & \cdots & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

- Při praktických výpočtech dochází k exponenciálnímu růstu velikosti prvků matice U **zřídka**.
- Velikost růstového faktoru obecně **nesouvisí s** $\kappa(A)$.

Škálování

- Téměř vždy, je-li to možné, se v rámci předzpracování dat provádí **škálování** matice.
- Jsou-li D_1 a D_2 regulární diagonální matice, pak

$$D_1 A D_2 y = D_1 b, \quad x = D_2 y.$$

- Důvody pro škálování:
 - normalizace naměřených dat,
 - redukce čísla podmíněnosti.
- Obvykle normalizujeme řádky či sloupce $\rightarrow$ redukuje číslo podmíněnosti téměř optimálně (až na faktor $\sqrt{n}$).
- Škálování **může ovlivnit výběr pivota**, posloupnost prováděných operací a tím i stabilitu výpočtu.

Choleského rozklad

hermitovské pozitivně definitní matice

- Aplikujme Gaussovu eliminaci **na hermitovskou pozitivně definitní** (HPD) matici.
- Pro HPD matice je Gaussova eliminace **vždy proveditelná bez pivotace**. (HPD matice je silně regulární – cvičení).

Věta: Choleského rozklad

Pro každou HPD matici A existuje jednoznačný rozklad

$$A = LL^*,$$

kde L je dolní trojúhelníková matice s kladnými prvky na diagonále.

Choleského rozklad - algoritmus

```
input  $A^{(0)} := A = [a_{i,j}]$   
for  $k = 1 : n$  do  
   $l_{k,k} := \sqrt{a_{k,k}^{(k-1)}}$   
  for  $i = k + 1 : n$  do  
     $l_{i,k} := \frac{a_{i,k}^{(k-1)}}{l_{k,k}}$   
    for  $j = k + 1 : i$  do  
       $a_{i,j}^{(k)} := a_{i,j}^{(k-1)} - l_{i,k} l_{j,k}$   
    end for  
  end for  
end for
```

- Pro řádky $\underline{l}_i^T$ matice L platí

$$\underline{l}_i^T \underline{l}_i = \|\underline{l}_i\|^2 = a_{i,i} \quad \Rightarrow \quad \|L\|_F^2 = \sum_{i=1}^n a_{i,i} = \text{trace}(A).$$

- V přesné aritmetice je velikost prvků matice L omezena a nemůže dojít k jejich růstu jak je tomu u LU rozkladu.

Zpětná stabilita Choleského rozkladu

Zpětná stabilita Choleského rozkladu

Nechť $\hat{L}$ je vypočtený faktor Choleského rozkladu hermitovské pozitivně definitní matice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ na počítači se strojovou přesností $\mathbf{u}$ a nechť je $n^{3/2} \mathbf{u} \ll 1$. Potom pro matici E takovou, že $A + E = \hat{L}\hat{L}^*$, platí

$$\|E\|_F \leq \left(\frac{2n^{3/2}}{1 - 2n^{3/2}\mathbf{u}} \right) \mathbf{u} \|A\|_F + \mathcal{O}(\mathbf{u}^2).$$

- Důkaz ve skriptech.
- Choleského rozklad **je zpětně stabilní** nezávisle na prvcích Choleského faktoru $\hat{L}$.

Iterační zpřesnění Gaussovy eliminace

Nechť je dána soustava $Ax = b$. Jak zpřesnit řešení soustavy lineárních rovnic?

- ① GE s částečnou pivotací $\rightarrow x_1$. Pro **reziduum** r_1 platí,

$$r_1 = b - Ax_1 = Ax - Ax_1 = A(x - x_1) \equiv Ae^{(1)}.$$

- ② GE s částečnou pivotací **řešíme soustavu**,

$$Ae^{(1)} = r_1,$$

získáme aproximaci $\hat{e}^{(1)}$ chyby řešení $e^{(1)}$.

- ③ **Použijeme $\hat{e}^{(1)}$ ke zpřesnění** řešení,

$$x_2 = x_1 + \hat{e}^{(1)}.$$

- ④ Lze iterovat.

- ⑤ Zpřesňujeme řešení? Pohledy - **přímá a zpětná chyba**.

Iterační zpřesnění Gaussovy eliminace

Dvě možnosti

- **Mixed precision iterative improvement.** Pokud má být spočtené řešení x_2 přesnější než řešení x_1 ve smyslu **přímé chyby**, je nutné provádět **výpočet rezidua r_1 se zvýšenou přesností** → lze dosáhnout zpřesnění řešení na maximální počet platných cifer v dané standardní aritmetice.
- **Fixed precision iterative improvement.** K redukci **zpětné chyby** řešení na úroveň u je postačuje provádět **všechny výpočty ve stejné aritmetice** (Skeel 1980), x_2 přesné řešení

$$(A + \Delta A)x_2 = b, \quad \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \approx u + \mathcal{O}(u^2).$$

- Běžně stačí provést jen několik iterací. Jedna iterace zajistí zpětnou stabilitu výpočtu, tedy x_2 je již zpětně stabilní.

Výpočetní náklady Gaussovy eliminace

viz cvičení

Operace	celkem
$\times$	$\frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n$
$-$	$\frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n$
$:$	$\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$

$\sim \frac{2}{3}n^3$ operací

Tabulka: Přímý chod (v každém kroku dělíme číslem $a_{j,j}$).

Operace	celkem
$\times$	$\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$
$+$	$\frac{1}{2}n^2 - \frac{3}{1}n + 1$
$-$	$n - 1$
$:$	1

$\sim n^2$ operací

Tabulka: Zpětný chod

Gaussova eliminace pro velké řídké úlohy

- Velké **řídké** matice $\rightarrow$ mnoho nulových prvků.
- O řídké matici mluvíme, **je-li výhodné** použít struktury pro ukládání pouze nenulových prvků matice (šetří-li to paměť a urychluje výpočet).
- Matici, která není řídká, budeme říkat **hustá**.
- **Motivace pivotace** může být dvojí:
 - numerická stabilita,
 - omezení zaplnění.

Zaplňení matice při Gaussově eliminaci

Příklad

Dána A s následující strukturou nenulových prvků

$$A = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \bullet & \bullet & & & & \\ \bullet & & \bullet & & & \\ \bullet & & & \bullet & & \\ \bullet & & & & \bullet & \\ \bullet & & & & & \bullet \end{bmatrix}.$$

Pomocí permutační matice P , lze matici A transformovat na matici B , $B = PAP^T$, s následující strukturou

$$B = \begin{bmatrix} \bullet & & & & \bullet \\ & \bullet & & & \bullet \\ & & \bullet & & \bullet \\ & & & \bullet & \bullet \\ & & & & \bullet \\ \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{bmatrix}, \quad P \equiv \begin{bmatrix} & & & & 1 \\ & \ddots & & & \\ 1 & & & & \end{bmatrix}.$$

Zaplňení matice při Gaussově eliminaci

Příklad – pokračování I

- Soustava rovnic

$$Ax = b \quad \Leftrightarrow \quad P^T APx = b \quad \Leftrightarrow \quad By = b,$$

kde $x = Py$. Obě soustavy se liší pouze pořadím rovnic a pořadím hledaných neznámých.

- Soustava s $A \rightarrow$ po prvním kroku je $A^{(1)}$ **obecně hustá**,

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \end{bmatrix}.$$

Zaplnění matice při Gaussově eliminaci

Příklad – pokračování II

- Počet nenulových prvků $A^{(1)}$ vzroste oproti A

$$z \quad 3n - 2 \quad \text{na} \quad n^2 - n + 1.$$

- Příklad: $n = 10^6$, double precision (64 bitů na číslo). Pak
 - $A \dots 23$ megabytů,
 - $A^{(1)} \dots 7\,450$ gigabytů.
- Řešíme-li soustavu s B bez pivotace, stačí $8(3n - 2)$ bytů.

Řídkost, zaplnění, stabilita

- Řídkosti matic lze využít ke **zmenšení velikosti potřebné paměti** i ke **zmenšení počtu prováděných operací**. Podstatné u velkých matic.
- Obecně se snažíme nalézt permutační matice P , Q takové, aby v LU rozkladu matice $B = PAQ^T$ docházelo k **malému zaplnění** a výpočet byl zároveň **rozumně stabilní**.
- Snaha zajistit numericky stabilní výpočet pomocí vhodné pivotace **může působit** (a často také působí) **proti** snaze minimalizovat zaplnění,

numerická stabilita $\times$ zaplnění.

Srovnání LU a QR rozkladu pro řešení soustav rovnic

Srovnání z několika hledisek

- **Stabilita.**

- LU rozklad ... **podmíněně zpětně stabilní**,
- QR rozklad ... **zpětně stabilní**.

- **Výpočetní náklady.** Algoritmy pro husté matice:

- LU rozklad ... $\frac{2}{3}n^3$ aritmetických operací,
- QR rozklad ... $\frac{4}{3}n^3$ aritmetických operací.

- **Zaplnění.** Často rozhodující kritérium.

- Téměř **výhradně LU rozklad**.
- U QR nejsme schopni udržet faktory Q a R řídké.

Cvičení

4.1 Uvažujme eliminační matici $M_k \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Ukažte, že

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

4.2 Necht $M_1, \dots, M_{n-1}$ jsou eliminační matice. Dokažte, že platí

$$M_1 M_2 M_3 \dots M_{n-1} = I + \sum_{i=1}^{n-1} m_i e_i^T.$$

4.3 Necht $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Sestrojte permutační matici P takovou, že zaměňuje i -tý a j -tý řádek matice A . Ukažte, jak lze pomocí P zaměnit i -tý a j -tý sloupec matice A .

Cvičení

4.4 Použijte Gaussovu eliminaci s pivotací na matici

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & 0 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Sledujte velikosti prvků ve vznikající horní trojúhelníkové matici U .

4.5 Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je matice hermitovská pozitivně definitní. Ukažte pomocí blokového rozdělení

$$A = \begin{bmatrix} \tilde{A}_k & A_{2,1}^* \\ A_{2,1} & A_{2,2} \end{bmatrix},$$

kde $\tilde{A}_k$ je hlavní submatice obsahující prvních k řádků a sloupců matice A , že A je silně regulární.

4.6 Použijte standardních sčítacích vzorců

$$\sum_{k=1}^n k = \frac{1}{2} n(n+1) \quad \text{a} \quad \sum_{k=1}^n k^2 = \frac{1}{6} n(2n+1)(n+1)$$

k tomu, abyste ukázali, jaká je výpočetní náročnost přímého chodu Gaussovy eliminace a zpětného chodu Gaussovy eliminace.