LU rozklad

- $\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$
- někdy je třeba prohodit sloupce/řádky

Terminologie

Definice: Čtvercová matice je *horní trojúhelníková*, pokud má nenulové prvky soustředěny jen v horním trojúhelníku, jinými slovy, pokud má pod diagonálou jen nulové prvky.

Čtvercová matice se nazývá *dolní trojúhelníková*, pokud má nenulové prvky soustředěny v dolním trojúhelníku, jinými slovy, pokud má nad diagonálou jen nulové prvky.

Pozorování: Čtvercovou matici lze přímým chodem eliminační metody převést na horní trojúhelníkovou matici. Schodovitá čtvercová matice je totiž horní trojúhelníková.

Na co LU rozklad

Nechť $\mathbf{A}$ je regulární čtvercová matice. Předpokládejme, že se podaří najít dolní trojúhelníková matice $\mathbf{L}$ a horní trojúhelníková matice $\mathbf{U}$ tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$. Máme za úkol řešit soustavu

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Nahradíme v soustavě matici $\mathbf{A}$ součinem $\mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$ a označíme $\mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{z}$. Dostáváme:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \text{právě když} \quad \mathbf{L} \cdot \mathbf{z} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{z}.$$

Nejprve vyřešíme soustavu $\mathbf{L} \cdot \mathbf{z} = \mathbf{b}$ dopřednou substitucí a potom dosadíme $\mathbf{z}$ do pravé strany soustavy $\mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{z}$, kterou řešíme zpětnou substitucí.

Algoritmus LU rozkladu

Na matici $\mathbf{A}$ provádíme jen jeden typ eliminační úpravy: přičtení α-násobku nějakého řádku k jinému, který je napsán pod ním. Tuto úpravu lze „emulovat“ násobením zleva maticí $\mathbf{L}_i$, která je jistě dolní trojúhelníková.

$$\begin{aligned}\mathbf{A} \sim \mathbf{A}_1 = \mathbf{L}_1\mathbf{A} \sim \mathbf{A}_2 = \mathbf{L}_2(\mathbf{L}_1\mathbf{A}) \sim \\ \sim \mathbf{A}_3 = \mathbf{L}_3(\mathbf{L}_2(\mathbf{L}_1\mathbf{A})) \sim \cdots \sim \mathbf{U} = (\mathbf{L}_k \cdots \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1)\mathbf{A}\end{aligned}$$

Součin dolních trojúhelníkových matic s jedničkami na diagonále je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále. Inverze dolní trojúhelníkové matice s jedničkami na diagonále je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále. Takže:

$$\mathbf{L}'\mathbf{A} = \mathbf{U}, \qquad \mathbf{A} = (\mathbf{L}')^{-1}\mathbf{U} = \mathbf{L}\mathbf{U}.$$

Příklad

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \\ 4 & 2 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & -6 & -12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -4 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{A} \sim$$

$$\sim \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 18 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -6 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ -4 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{L}_2 \cdot \mathbf{L}_1 \cdot \mathbf{A}$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_1^{-1} \cdot \mathbf{L}_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 4 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 6 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 4 & 6 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -1 & -5 \\ 0 & 0 & 18 \end{pmatrix}$$

Jak vzniká matice L

Platí $\mathbf{L} = (\mathbf{L}_k \cdots \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1)^{-1} = \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\mathbf{L}_3^{-1} \cdots \mathbf{L}_k^{-1}$. Je:

$$\mathbf{L}_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 1 & \ldots & 0 & \ldots & 0 \\ & & \ldots & & \ldots & \\ 0 & 0 & \ldots & 1 & \ldots & 0 \\ & & \ldots & & \ldots & \\ 0 & 0 & \ldots & -\alpha & \ldots & 0 \\ & & \ldots & & \ldots & \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix},$$

kde α_i je koeficient eliminačního kroku. Celkový součin matic $\mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\mathbf{L}_3^{-1} \cdots \mathbf{L}_k^{-1}$ (v uvedeném pořadí) obsahuje pod diagonálou na odpovídajících místech opačné hodnoty koeficientů všech eliminačních kroků, které byly v eliminaci provedeny.

Jiný příklad

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 1 \\ 4 & 2 & 0 \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -5 \\ 0 & -6 & -12 \end{pmatrix}$$

Nelze pokračovat v eliminaci bez prohození řádků…

Problém

Přestože $\mathbf{A}$ je regulární, může se stát, že během eliminace se objeví nulový diagonální prvek. Klasická eliminace pak dovoluje prohodit řádky. To je ale emulováno násobením zleva permutační maticí $\mathbf{P}_{i,j}$, která není dolní trojúhelníková. Výsledný součin emulačních matic pak není dolní trojúhelníková matice.

Je tedy třeba prohodit řádky matice $\mathbf{A}$ tak, aby nová matice $\mathbf{A}'$ tento problém neměla a dala se rozložit na $\mathbf{L}\cdot\mathbf{U}$. Nechť $\mathbf{P}'$ je vhodná permutační matice. Pak $\mathbf{P}' \cdot \mathbf{A}$ prohazuje řádky. Předpokládejme:

$$\mathbf{A}' = \mathbf{P}' \cdot \mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}.$$

Označme $(\mathbf{P}')^{-1} = \mathbf{P}$. To je také permutační matice. Platí totiž $(\mathbf{P}')^{-1} = (\mathbf{P}')^T$. S tímto označením dostáváme rozklad:

$$\mathbf{A} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$$

Otázka

Nechť $\mathbf{A}$ je regulární.

Půjde vždy najít takové prohození řádků matice $\mathbf{A}$, aby pak eliminace s jediným povoleným typem operace (přičtení α-násobku řádku k řádku pod ním) dovedla převést matici na horní trojúhelníkovou?

Odpověď: Ano.

Zdůvodnění: pokud narazíme při eliminaci na potřebu prohodit řádky, prohodíme je ve výchozí matici $\mathbf{A}$ a eliminujeme znovu od začátku. Tuto metodu „pokus-omyl“ opakujeme tak dlouho, až se povede matici $\mathbf{A}$ s prohozenými řádky eliminovat na $\mathbf{U}$.

Praktický výpočet LU rozkladu

se samozřejmě nedělá metodou pokus-omyl. Koeficienty eliminačních kroků násobíme -1 a ukládáme postupně do matice $\mathbf{L}$, která je na počátku eliminace jednotková. Při potřebě prohodit řádky prohodíme také řádky v matici $\mathbf{L}$, ale necelé: při prohazování k-tého řádku s $(k+j)$-tým v eliminované matici prohodíme v matici $\mathbf{L}$ tytéž řádky, ale jen po sloupec $k-1$.

Další vylepšené numerické metody LU rozkladu mají stejnou složitost jako algoritmus pro maticové násobení.

Shrnutí

Věta: Ke každé regulární matici $\mathbf{A}$ existují matice:

- $\mathbf{P}$ … permutační matice,
- $\mathbf{L}$ … dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále,
- $\mathbf{U}$ … horní trojúhelníková matice,

tak, že $\mathbf{A} = \mathbf{P} \cdot \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$.

Poznámka: při výskytu nulového prvku na diagonále lze také místo řádků prohodit sloupce. Pak se permutační matice $\mathbf{P}_{i,j}$ „nemíchají“ s maticemi $\mathbf{L}_i$, neboť násobí matici $\mathbf{A}$ zprava. Dostáváme pak vzorec: $\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{P}$.