Numerička matematika
3. predavanje

Saša Singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Rješavanje linearnih sustava:
  - Uvod i ponavljanje teorije o linearnim sustavima.
  - Gaussove eliminacije.
  - Zamjene jednadžbi (redaka) — parcijalno pivotiranje.
  - Zamjene redaka i stupaca — potpuno pivotiranje.
  - Gaussove eliminacije — algoritam i složenost.
  - LR (LU) faktorizacija.
  - Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije.
  - Pivotiranje u LR (LU) faktorizaciji.
  - Perturbacije linearnih sustava i uvjetovanost matrice.

Rješavanje linearnih sustava

Općenito o linearnim sustavima — teorija

Neka je $\mathbb{F} = \mathbb{R}$ polje realnih brojeva (može i $\mathbb{F} = \mathbb{C}$).

Zadani su:

- (pravokutna) matrica $A \in \mathbb{F}^{m \times n}$ i vektor $b \in \mathbb{F}^m$.

Tražimo rješenje linearnog sustava

$$Ax = b.$$

Teorem Kronecker–Capelli kaže da linearni sustav $Ax = b$

- ima rješenje $x \in \mathbb{F}^n$ — ako i samo ako je rang matrice A, u oznaci r, jednak rangu proširene matrice $\widehat{A} = [\, A \mid b \,]$,
- rješenje sustava je jedinstveno ako je $r = n$.

Znamo čak i malo više!

Linearni sustavi — teorija (nastavak)

Opće rješenje sustava $Ax = b$ (ako postoji) ima oblik

$$x = x_p + \mathcal{N}(A),$$

gdje je

- x_p jedno partikularno rješenje polaznog sustava $Ax = b$,
- $\mathcal{N}(A)$ je nul-potprostor od A, ili opće rješenje pripadnog homogenog sustava $Ax = 0$.

Iz teorema o rangu i defektu za matricu A

$$r + \dim \mathcal{N}(A) = n,$$

slijedi tvrdnja o jedinstvenosti rješenja:

- $\dim \mathcal{N}(A) = 0 \iff r = n$.

Linearni sustavi — od teorije prema praksi

U praksi se najčešće rješavaju linearni sustavi $Ax = b$ kod kojih je matrica A kvadratna i regularna.

- A kvadratna — znači da je $m = n$ (A je reda n).
- A regularna — znači, na primjer, $\det A \neq 0$.

Iz teorema Kronecker–Capelli onda izlazi da

- rješenje x takvog sustava postoji i jedinstveno je.

$\Longrightarrow$ ima smisla promatrati algoritme za računanje rješenja.

Nema smisla računati nešto što (možda) ne postoji, ili nije jedinstveno (koje od beskonačno mnogo rješenja računamo).

Oprez: To što unaprijed znamo da je A regularna

- ne znači da to vrijedi i numerički!

Kako naći rješenje? — Inverz matrice

Teorija (1). Možemo naći inverz matrice A, tj. matricu A^{-1}

- i slijeva pomnožiti sustav $Ax = b$ matricom A^{-1}.

Dobivamo

$$x = A^{-1}b.$$

Samo je pitanje: Kako ćemo izračunati inverz A^{-1}?

Zaključak: Lakši problem sveli smo na teži — u prijevodu, pali smo s konja na magarca.

Zašto? Jednostavno, zato što je

- j-ti stupac inverza, upravo, rješenje sustava $Ax = e_j$.

Dakle, za n stupaca od A^{-1} treba riješiti n linearnih sustava. A krenuli smo od jednog (sustava)! Ne tako!

Kako naći rješenje? — Cramerovo pravilo

Teorija (2). Iz linearne algebre znate za Cramerovo pravilo:

- j-ta komponenta rješenja sustava je

$$x_j = \frac{\det A_j}{\det A}, \quad j = 1, \ldots, n,$$

- pri čemu je matrica A_j jednaka matrici A,
- osim što je j-ti stupac u A_j zamijenjen desnom stranom b.

Treba još "samo" izračunati determinante — i to $n+1$ njih.
A kako ćemo to?

"Klasični" odgovor: pa … recimo, Laplaceovim razvojem.

Jao, jao … Bilo kako, samo ne tako!

Kako naći rješenje? — Zaboravite Cramera

Zašto? Laplaceovim razvojem dobijemo (kao u definiciji det)

- “samo” $n!$ pribrojnika u svakoj determinanti,
- a svaki pribrojnik je produkt od n faktora.

Prava “sitnica”. I tako to, još $n + 1$ puta . . .

Zaključak: Ako determinante računamo na ovaj način,

- složenost Cramerovog pravila za rješavanje linearnog sustava je eksponencijalna u n (dokažite to!)
- i nikad se ne koristi kao metoda numeričkog rješavanja.

Zaboravite determinante i Cramera — finale

Komentar: Determinante možemo računati i puuuno brže,

- tako da matricu svedemo na trokutasti oblik,
- postupkom sličnim Gaussovim eliminacijama.

Naime, determinanta trokutaste matrice (gornje ili donje) je

- produkt dijagonalnih elemenata,

pa se lako računa!

No, isti postupak eliminacija koristimo i za

- rješavanje "cijelog" linearnog sustava $Ax = b$,
- i to samo jednom, a ne $n + 1$ puta.

Dakle, Cramerovo pravilo se ne isplati ni kad ovako računamo determinante.

Kako naći rješenje? — Gaussove eliminacije!

Najjednostavnija metoda za rješavanje linearnih sustava su

- Gaussove eliminacije, odnosno,
- slične metode svođenja na trokutastu formu.

Ideja: Sustav $Ax = b$ se ekvivalentnim transformacijama svodi na sustav oblika

$$Rx = y,$$

gdje je

- R trokutasta matrica (recimo, gornja),

iz kojeg se lako, tzv. povratnom supstitucijom, nalazi rješenje.

Oznaka R — "right" (desna) = gornja trokutasta matrica.

Ekvivalentne transformacije sustava

Ekvivalentne transformacije sustava su

- one koje ne mijenjaju rješenje sustava.

Standardne ekvivalentne transformacije su (v. LA):

- zamjena poretka jednadžbi (nužno!),
- množenje jednadžbe brojem različitim od nule,
  - ova transformacija "skaliranja" se obično ne koristi, ili se vrlo pažljivo koristi — za povećanje stabilnosti,
- množenje jedne jednadžbe nekim brojem i dodavanje drugoj jednadžbi (ključno!),

  $=$ dodavanje linearne kombinacije preostalih jednadžbi, s tim da uzmemo samo jednu preostalu jednadžbu.

Gaussove eliminacije

Gaussove eliminacije — algoritam

Označimo $A^{(1)} := A$, $b^{(1)} := b$ na početku prvog koraka.

U skraćenoj notaciji, bez pisanja nepoznanica x_i, linearni sustav $Ax = b$ možemo zapisati proširenom matricom, kao

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ldots & \vdots & \vdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array}\right].$$

Svođenje na trokutastu formu radimo u $n - 1$ koraka.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

1. korak.

- U prvom stupcu matrice $A^{(1)}$ poništimo sve elemente, osim prvog, tj. sve elemente strogo ispod dijagonale.

Kako se to radi?

Ako je element $a_{11}^{(1)} \neq 0$, onda redom, možemo

- od i-te jednadžbe oduzeti
- prvu jednadžbu pomnoženu s

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, \ldots, n.$$

Pritom se prva (tzv. "ključna") jednadžba ne mijenja.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Prva jednadžba — kao redak proširene matrice $[\, A^{(1)} \mid b^{(1)} \,]$, je

$$\begin{array}{cccc:c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \end{array}.$$

Polazna i-ta jednadžba — pisana na isti način, za $i = 2, \ldots, n$,

$$\begin{array}{cccc:c} a_{i1}^{(1)} & a_{i2}^{(1)} & \cdots & a_{in}^{(1)} & b_i^{(1)} \end{array}.$$

Nova i-ta jednadžba — pisana na isti način, za $i = 2, \ldots, n$,

$$\begin{array}{cccc:c} a_{i1}^{(2)} & a_{i2}^{(2)} & \cdots & a_{in}^{(2)} & b_i^{(2)} \end{array}.$$

Relacije za nove elemente su

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)},$$

za $j = 1, \ldots, n$, $i = 2, \ldots, n$. Prvi redak $(i = 1)$ ostaje isti.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Iz ovih relacija za nove elemente (prepisane još jednom)

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - m_{i1} b_1^{(1)},$$

vidimo da su multiplikatori

$$m_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, \ldots, n.$$

odabrani upravo tako da je $a_{i1}^{(2)} = 0$, za $i = 2, \ldots, n$.

Dakle, nakon prvog koraka dobivamo proširenu matricu $[\, A^{(2)} \mid b^{(2)} \,]$ u kojoj

- prvi stupac ima nule (strogo) ispod dijagonale, tj. gornju trokutastu formu.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Time smo dobili ekvivalentni linearni sustav $A^{(2)}x = b^{(2)}$ s proširenom matricom

$$\left[\begin{array}{cccc|c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & b_n^{(2)} \end{array}\right].$$

Postupak poništavanja možemo nastaviti s drugim stupcem matrice $A^{(2)}$ — na isti način.

Ako je $a_{22}^{(2)} \neq 0$, biramo faktore m_{i2} tako da poništimo sve elemente drugog stupca ispod dijagonale. I tako redom.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Općenito, k–ti korak izgleda ovako, za $k = 1, \ldots, n-1$:

- iz proširene matrice $[\, A^{(k)} \mid b^{(k)} \,]$ dobivamo novu proširenu matricu $[\, A^{(k+1)} \mid b^{(k+1)} \,]$,
- tako da poništimo sve elemente strogo ispod dijagonale u k–tom stupcu matrice $A^{(k)}$, koristeći "ključni" k-ti redak.

Relacije za nove elemente koje treba izračunati u matrici $A^{(k+1)}$ i vektoru $b^{(k+1)}$ su

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, \qquad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)},$$

za $i, j = k+1, \ldots, n$. Iz $a_{ik}^{(k+1)} = 0$, multiplikatori m_{ik} su

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \qquad i = k+1, \ldots, n.$$

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Prvih k redaka u $[\,A^{(k+1)} \mid b^{(k+1)}\,]$ ostaju isti kao u $[\,A^{(k)} \mid b^{(k)}\,]$.

Konačno, ako su svi $a_{ii}^{(i)} \neq 0$, za $i = 1, \ldots, n-1$ (ne treba n), završni linearni sustav $[\,A^{(n)} \mid b^{(n)}\,]$, ekvivalentan polaznom, je

$$\left[\begin{array}{cccc:c} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} & b_1^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} & b_2^{(2)} \\ & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)} & b_n^{(n)} \end{array}\right].$$

Dobili smo gornju trokutastu matricu $R = A^{(n)}$ (nule u strogo donjem trokutu matrice R ne pišemo).

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Uz pretpostavku da je $a_{nn}^{(n)} \neq 0$, ovaj se linearni sustav lako rješava tzv. povratnom supstitucijom (supstitucijom unatrag)

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}},$$

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i)}} \left(b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j \right), \quad i = n-1, \ldots, 1.$$

Pitanje: Ako je A kvadratna i regularna matrica,

- moraju li svi elementi $a_{ii}^{(i)}$ biti različiti od nule?

To je nužno (i dovoljno) da algoritam “prođe” u ovom obliku.

Gaussove eliminacije — primjedba na algoritam

Odgovor: Ne!

Primjer. Linearni sustav $Ax = b$, s proširenom matricom

$$[\,A \mid b\,] = \left[\begin{array}{cc|c} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \end{array}\right],$$

je regularan ($\det A = -1$), sustav ima jedinstveno rješenje $x_1 = x_2 = 1$,

- a ipak ga ne možemo riješiti Gaussovim eliminacijama,
- ako ne mijenjamo poredak jednadžbi.

Zaključak: Moramo dozvoliti promjenu poretka jednadžbi.

Gaussove eliminacije s pivotiranjem

Pitanje: Dozvolimo li promjene poretka jednadžbi — tzv. "pivotiranje" u stupcu kojeg poništavamo,

- može li se Gaussovim eliminacijama s pivotiranjem riješiti svaki sustav kojemu je matrica A kvadratna i regularna?

Odgovor: Ako dozvolimo pivotiranje u svakom koraku,

- zamjenom "ključne" jednadžbe i bilo koje druge koja ima ne-nula element (u tom stupcu, ispod dijagonale),
- Gaussovim eliminacijama rješiv je svaki regularni kvadratni linearni sustav.

Objašnjenje: Ako u prvom stupcu ne postoji ne-nula element, matrica je singularna. Isto vrijedi i za svaki sljedeći korak = stupac ispod dijag. (Dokaz: Laplaceov razvoj determinante!)

Gaussove eliminacije — kako pivotiramo?

Pitanje: Kako vršiti pivotiranje, tj. zamjene jednadžbi?

- Zamjenom "ključne" jednadžbe i bilo koje druge koja ima ne-nula element (u tom stupcu, ispod dijagonale)?

Odgovor: Tu je ključna razlika između egzaktnog i približnog računanja (kad imamo greške zaokruživanja).

- U teoriji — kod egzaktnog računanja, dovoljno je naći bilo koji ne-nula element (u tom stupcu, ispod dijag.).
- U praksi — kad računamo približno, to može dovesti do potpuno pogrešnog rezultata.

Jedna jedina operacija može upropastiti rezultat!

- Postoji i puno bolja strategija za pivotiranje, kojom se to (barem dijelom) može izbjeći.

Gaussove eliminacije — primjer

Primjer. Zadan je linearni sustav

$$\begin{aligned} 0.0001\, x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2. \end{aligned}$$

Matrica sustava je regularna, pa postoji jedinstveno rješenje

$$x_1 = \frac{10000}{9999} = 1.\dot{0}00\dot{1}, \qquad x_2 = \frac{9998}{9999} = 0.\dot{9}99\dot{8}.$$

Riješimo taj sustav "računalom" u bazi 10 — s 4 značajne znamenke mantise i 2 znamenke eksponenta (ovo nije bitno).

Uočiti: Broj $0.0001 = 10^{-4}$ je "mali", ali nije nula. Po teoriji,

- možemo ga uzeti kao prvi (ili bilo koji) ne-nula element.

Gaussove eliminacije — primjer (nastavak)

U takvom "računalu", sustav se pamti bez greške, kao

$$\begin{aligned} 1.000 \cdot 10^{-4}\, x_1 + 1.000 \cdot 10^0\, x_2 &= 1.000 \cdot 10^0 \\ 1.000 \cdot 10^0 \quad x_1 + 1.000 \cdot 10^0\, x_2 &= 2.000 \cdot 10^0. \end{aligned}$$

Množenjem prve jednadžbe s -10^4 i dodavanjem drugoj, dobivamo novu drugu jednadžbu

$$(1.000 \cdot 10^0 - 1.000 \cdot 10^4)\, x_2 = 2.000 \cdot 10^0 - 1.000 \cdot 10^4.$$

Oduzimanje u računalu se vrši tako da manji eksponent postane jednak većem, a mantisa se denormalizira. Dobivamo

$$\begin{aligned} 1.000 \cdot 10^0 &= 0.100 \cdot 10^1 = 0.010 \cdot 10^2 = 0.001 \cdot 10^3 \\ &= 0.000|1 \cdot 10^4. \end{aligned}$$

Gaussove eliminacije — primjer (nastavak)

Za zadnju jedinicu nema mjesta u mantisi, pa je mantisa postala 0, tj. prvi broj "nema" utjecaja na rezultat. Slično se dogodi i s desnom stranom (i 2 je "zanemariv" prema 10^4).

Dakle, nova druga jednadžba glasi

$$-1.000 \cdot 10^4 \, x_2 = -1.000 \cdot 10^4.$$

Rješenje ove jednadžbe je očito $x_2 = 1.000 \cdot 10^0$. Uvrštavanjem u prvu jednadžbu, dobivamo

$$\begin{aligned} 1.000 \cdot 10^{-4} \, x_1 &= 1.000 \cdot 10^0 - 1.000 \cdot 10^0 \, \cdot \, 1.000 \cdot 10^0 \\ &= 0.000 \cdot 10^0, \end{aligned}$$

pa je $x_1 = 0$, što nije ni približno točan rezultat.

Gaussove eliminacije — primjer (nastavak)

Razlog za ogromnu relativnu grešku (100%):

- prvu jednadžbu množimo velikim brojem -10^4 (po apsolutnoj vrijednosti) i dodajemo drugoj,
- što “uništava” drugu jednadžbu.

Drugim riječima, utjecaj polazne druge jednadžbe

- postaje zanemariv u novoj drugoj jednadžbi.

U polaznoj drugoj je moglo pisati “bilo što” (dovoljno malo)!

Isto bi nam se dogodilo za bilo koju drugu jednadžbu oblika

$$x_1 + \alpha x_2 = \beta,$$

gdje su $|\alpha|, |\beta| < 5$. (Za ovo “računalo” je $u = 5 \cdot 10^{-4}$.)

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Promijenimo li poredak jednadžbi, dobivamo

$$1.000 \cdot 10^{0} \; x_1 + 1.000 \cdot 10^{0} \, x_2 = 2.000 \cdot 10^{0}$$

$$1.000 \cdot 10^{-4} \, x_1 + 1.000 \cdot 10^{0} \, x_2 = 1.000 \cdot 10^{0}.$$

Množenjem prve jednadžbe s -10^{-4} i dodavanjem drugoj, dobivamo novu drugu jednadžbu

$$(1.000 \cdot 10^{0} - 1.000 \cdot 10^{-4}) \, x_2 = 1.000 \cdot 10^{0} - 2.000 \cdot 10^{-4}.$$

Ovdje nema oduzimanja — drugi broj s 10^{-4} je “zanemariv” prema 1, na obje strane. Dakle, nova druga jednadžba sad glasi

$$1.000 \cdot 10^{0} \, x_2 = 1.000 \cdot 10^{0}.$$

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Ponovno dobivamo rješenje $x_2 = 1.000 \cdot 10^0$. Međutim, uvrštavanjem u prvu jednadžbu dobivamo

$$\begin{aligned} 1.000 \cdot 10^0 \, x_1 &= 2.000 \cdot 10^0 - 1.000 \cdot 10^0 \cdot 1.000 \cdot 10^0 \\ &= 1.000 \cdot 10^0, \end{aligned}$$

pa je $x_1 = 1.000 \cdot 10^0$, što je točan rezultat — korektno zaokruženo egzaktno rješenje na četiri decimalne znamenke!

Razlog za vrlo malu relativnu grešku:

- prvu jednadžbu sad množimo malim brojem -10^{-4} (po apsolutnoj vrijednosti) i dodajemo drugoj,
- što nema utjecaja na drugu jednadžbu — tj. ovdje nema "uništavanja" jednadžbi.

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Kao i ranije, u koraku eliminacije,

- (bivša) druga jednadžba nema utjecaja na (bivšu) prvu.

Međutim, nakon zamjene

- prva jednadžba (bivša druga) ostaje netaknuta u prvom koraku eliminacije i uredno utječe na rješenje.

Zaključak: Sigurno nije dovoljno uzeti

- prvi (bilo koji) ne-nula element u stupcu

kao ključni element za eliminacije,

- jer možemo dobiti potpuno pogrešan rezultat.

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Primjer. Usporedimo izračunata rješenja sustava

$$\begin{aligned} \varepsilon\, x_1 + x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2, \end{aligned}$$

za $\varepsilon = 10^{-4}, \ldots, 10^{-25}$, Gaussovim eliminacijama bez zamjena i sa zamjenom poretka jednadžbi, u aritmetici računala.

Računanjem u najvećoj dostupnoj preciznosti = tip `extended` ($u \approx 5.42 \cdot 10^{-20}$), dobivamo tablicu na sljedećoj stranici.

Za x_1 — crvene znamenke su pogrešne, ljubičaste su korektne kad ih zaokružimo, a zelene su točne. Za x_2 — obje metode daju iste (i točne) vrijednosti, pa je naveden samo jednom.

U prvom stupcu pišu samo eksponenti p, pri čemu je $\varepsilon = 10^p$.

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

p	x_1 bez pivotiranja	x_1 s pivotiranjem	x_2
-4	1.00010001000100000	1.00010001000100010	0.99989998999899990
-5	1.00001000010000200	1.00001000010000100	0.99998999989999900
-6	1.00000100000099609	1.00000100000100000	0.99999899999900000
-7	1.00000009999978538	1.00000010000001000	0.99999989999999000
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	
-17	0.99746599868666408	1.00000000000000001	0.99999999999999999
-18	0.97578195523695399	1.00000000000000000	1.00000000000000000
-19	1.08420217248550443	1.00000000000000000	1.00000000000000000
-20	0.00000000000000000	1.00000000000000000	1.00000000000000000
$\vdots$	isto	isto	isto

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

Standardni naziv: pivotni element = element koji se prije k-tog koraka eliminacije dovodi na dijagonalno mjesto $a_{kk}^{(k)}$.

U praksi se obično bira korištenjem parcijalnog pivotiranja.

- U k-tom koraku, pivotni element je po apsolutnoj vrijednosti najveći u "ostatku" k-tog stupca — na glavnoj dijagonali ili ispod nje.

Preciznije, ako je u k-tom koraku

$$|a_{rk}^{(k)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k)}|,$$

onda ćemo prvo zamijeniti r-ti i k-ti redak, a zatim početi korak eliminacije elemenata k-tog stupca.

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

Motivacija: Elementi "ostatka" linearnog sustava, koje treba izračunati u matrici $A^{(k+1)}$ u k-tom koraku transformacije, su

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, \quad b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - m_{ik} b_k^{(k)},$$

za $i, j = k+1, \ldots, n$, a multiplikatori m_{ik} su

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad i = k+1, \ldots, n.$$

Ako je multiplikator m_{ik} velik, u aritmetici računala može doći do kraćenja ili gubitka najmanje značajnih znamenki $a_{ij}^{(k)}$, tako da izračunati $a_{ij}^{(k+1)}$ može imati veliku relativnu grešku, ili bitno narasti $\to$ gubitak informacija iz originalne jednadžbe.

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

Sasvim općenito, ideja pivotiranja je minimizirati "korekcije" elemenata pri prijelazu s $A^{(k)}$ na $A^{(k+1)}$. Dakle,

- multiplikatori m_{ik} trebaju biti što manji, po apsolutnoj vrijednosti.

Ekvivalentno, pivotni element treba biti što veći, jer ulazi u nazivnik multiplikatora.

Za multiplikatore kod parcijalnog pivotiranja vrijedi

$$|m_{ik}| \leq 1, \quad i = k+1, \ldots, n.$$

U praksi, parcijalno pivotiranje funkcionira izvrsno, ali matematičari su konstruirali primjere kad ono "nije savršeno" (v. kasnije).

Gaussove eliminacije s potpunim pivotiranjem

Osim parcijalnog, može se provoditi i potpuno pivotiranje.

- U k-tom koraku, bira se najveći element u cijelom "ostatku" matrice $A^{(k)}$, a ne samo u k-tom stupcu.

Ako je u k-tom koraku

$$|a_{rs}^{(k)}| = \max_{k \leq i, j \leq n} |a_{ij}^{(k)}|,$$

onda ćemo prvo zamijeniti r-ti i k-ti redak, s-ti i k-ti stupac, a zatim početi korak eliminacije elemenata k-tog stupca.

Oprez: zamjenom s-tog i k-tog stupca zamijenili smo ulogu nepoznanica (varijabli) x_s i x_k.

Ovo nisu jedine mogućnosti pivotiranja kod rješavanja linearnih sustava.

GE s parcijalnim pivotiranjem — algoritam i složenost

Algoritam

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

```
/* Trokutasta redukcija */

za k = 1 do n - 1 radi {
    /* Nađi maks. |element| u ostatku stupca */
  max_elt = |A[k, k]|;
  ind_max = k;
  za i = k + 1 do n radi {
    ako je |A[i, k]| > max_elt onda {
      max_elt = |A[i, k]|;
      ind_max = i;
    }
  }
```

Algoritam (nastavak)

```
ako je max_elt > 0.0 onda {
    /* Matrica ima ne-nula element u stupcu */
  ako je ind_max <> k onda {
      /* Zamijeni k-ti i ind_max-ti redak */
    za j = k do n radi {
      temp = A[ind_max, j];
      A[ind_max, j] = A[k, j];
      A[k, j] = temp;
    }
    temp = b[ind_max];
    b[ind_max] = b[k];
    b[k] = temp;
  }
```

Algoritam (nastavak)

```
        /* Korak Gaussovih eliminacija */
    za i = k + 1 do n radi {
          /* Izračunaj multiplikator */
        mult = A[i, k] / A[k, k];
          /* Ažuriraj i-ti redak */
        za j = k + 1 do n radi {
          A[i, j] = A[i, j] - mult * A[k, j];
        }
        b[i] = b[i] - mult * b[k];
    }
  inače
    /* Matrica je singularna, STOP */
  }
```

Algoritam (nastavak)

```
/* Povratna supstitucija */

ako je A[n, n] <> 0.0 onda {
    /* Rješenje x */
  x[n] = b[n] / A[n, n];
  za i = n - 1 do 1 radi {
    sum = b[i];
    za j = i + 1 do n radi {
      sum = sum - A[i, j] * x[j];
    }
    x[i] = sum / A[i, i];
  }
}
inače
  /* Matrica je singularna, STOP */
```

Složenost algoritma

Prebrojimo sve aritmetičke operacije ovog algoritma.

U prvom koraku trokutaste redukcije obavlja se:

- $n - 1$ dijeljenje — računanje `mult`,
- $n(n-1)$ množenje — za svaki od $n - 1$ redaka imamo:
  - $n - 1$ množenje za računanje elemenata matrice A;
  - jedno množenje za računanje elementa vektora b,
- $n(n-1)$ oduzimanje — u istoj naredbi gdje i prethodna množenja.

Na sličan način zaključujemo da se u k-tom koraku obavlja:

- $n - k$ dijeljenja,
- $(n-k+1)\,(n-k)$ množenja i $(n-k+1)\,(n-k)$ oduzimanja.

Složenost algoritma (nastavak)

Ukupan broj aritmetičkih operacija u k-tom koraku je

$$n - k + 2(n - k + 1)\,(n - k) = 2(n - k)^2 + 3(n - k).$$

Broj koraka k varira od 1 do $n - 1$, pa je ukupan broj operacija potrebnih za svođenje na trokutastu formu jednak

$$\begin{aligned}\sum_{k=1}^{n-1} \big[\,2(n - k)^2 + 3(n - k)\,\big] &= \sum_{k=1}^{n-1} (2k^2 + 3k) \\ &= \frac{1}{6}(4n^3 + 3n^2 - 7n).\end{aligned}$$

Druga suma se dobije iz prve zamjenom indeksa $n - k \mapsto k$ (granice za sumu ostaju iste). Onda iskoristimo formule za sumu i sumu kvadrata prvih $n - 1$ prirodnih brojeva.

Složenost algoritma (nastavak)

Potpuno istim zaključivanjem dobivamo da u povratnoj supstituciji ima:

- $(n-1)\,n/2$ množenja i $(n-1)\,n/2$ zbrajanja,
- n dijeljenja,

što je, zajedno, točno n^2 operacija.

Dakle, ukupan broj operacija u Gaussovim eliminacijama je

$$OP(n) = \frac{1}{6}\big(4n^3 + 9n^2 - 7n\big),$$

što je približno $2n^3/3$, za malo veće n.

Gaussove eliminacije — komentari

Par završnih komentara, nakon detaljnog opisa metode.

Gaussove eliminacije su metoda direktnog transformiranja linearnog sustava $Ax = b$, zajedno s desnom stranom b.

Možemo ih implementirati i tako da se desna strana b ne transformira istovremeno kad i matrica A.

- Tada se formiraju dvije matrice L i R takve da je $A = LR$, gdje je R gornja trokutasta matrica iz Gaussovih eliminacija, a L je donja trokutasta matrica.
- Tako implementirane Gaussove eliminacije zovemo LR (ili LU) faktorizacija matrice A — standard u praksi.
- Ovaj pristup je posebno zgodan kad imamo više desnih strana za isti A.

Gaussove eliminacije — komentari (nastavak)

U praksi se koriste za "opće", ali ne pretjerano velike matrice (n u tisućama), ili za sustave s tzv. "vrpčastom" strukturom.

Složenost: Polinomna i to kubna, tj. $O(n^3)$, što je sporo za još veće sustave. Za njih se koriste iterativne metode.

Mnogi sustavi imaju specijalna svojstva koja koristimo za brže i/ili točnije rješenje. Na primjer,

- za simetrične, pozitivno definitne matrice koristi se "simetrična" LR faktorizacija, tzv. faktorizacija Choleskog,
- za dijagonalno dominantne sustave ne treba pivotiranje,
- za vrpčaste, posebno, trodijagonalne matrice, algoritam se drastično skraćuje (v. kubična spline interpolacija).

LR faktorizacija

LR faktorizacija

U praksi se linearni sustavi najčešće rješavaju korištenjem LR faktorizacije — matricu A faktoriziramo kao produkt matrica

$$A = LR,$$

pri čemu je

- L donja trokutasta matrica s jedinicama na dijagonali,
- R gornja trokutasta matrica.

Nazivi: "LR" = (left, right), "LU" = (lower, upper).

Matrica L je regularna, jer je $\det L = 1$. Onda je regularnost matrice A ekvivalentna regularnosti matrice R, jer vrijedi

$$\det A = \det L \cdot \det R = \det R.$$

LR faktorizacija — rješenje sustava

Ako znamo LR faktorizaciju od A, onda linearni sustav $Ax = b$ postaje

$$LRx = b.$$

Uz oznaku $y = Rx$, sustav $LRx = b$ svodi se na dva sustava

$$Ly = b, \qquad Rx = y.$$

Lako pamćenje: matrice u sustavima idu slijeva $\mapsto$ udesno.

Prednost LR faktorizacije:

- za zadani b, rješavaju se dva jednostavna sustava,
- desna strana b ne transformira se istovremeno s matricom A, pa promjena desne strane košta samo $O(n^2)$ operacija.

LR faktorizacija — rješenje sustava (nastavak)

Oba sustava se lako rješavaju:

- prvi $Ly = b$ — supstitucijom unaprijed

$$y_1 = b_1,$$

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij}\, y_j, \quad i = 2, \ldots, n,$$

- drugi $Rx = y$ — povratnom supstitucijom (unatrag)

$$x_n = \frac{y_n}{r_{nn}},$$

$$x_i = \frac{1}{r_{ii}} \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} r_{ij}\, x_j \right), \quad i = n-1, \ldots, 1.$$

LR faktorizacija — nalaženje

Kako izračunati elemente ℓ_{ij} i r_{ij} matrica L i R?

- Iskoristimo poznatu strukturu matrica L i R
- i činjenicu da je $A = L \cdot R$.

Dobivamo:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} \ell_{ik}\, r_{kj}, \quad \text{uz} \quad \ell_{ii} = 1.$$

Iz ovih n^2 jednadžbi računamo, redom, one elemente matrica L i R koje možemo izračunati iz već poznatih elemenata.

- Za $i = 1$, zbog $\ell_{11} = 1$, dobivamo prvi redak matrice R.
- Zatim, za $j = 1$, dobivamo prvi stupac matrice L, jer znamo r_{11}.
- I tako redom, $i = 2$, $j = 2$, …, $i = n$ (bez $j = n$).

LR faktorizacija — nalaženje (nastavak)

Tako dobivamo rekurzivne relacije za elemente matrica L i R

$$r_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1, \ldots, n,$$

$$\ell_{j1} = \frac{a_{j1}}{r_{11}}, \quad j = 2, \ldots, n,$$

za $i = 2, \ldots, n$:

$$r_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{ik}\, r_{kj}, \quad j = i, \ldots, n,$$

$$\ell_{ji} = \frac{1}{r_{ii}} \left(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} \ell_{jk}\, r_{ki} \right), \quad j = i+1, \ldots, n.$$

U zadnjem koraku, za $i = n$, računamo samo r_{nn} (nema ℓ-ova).

LR faktorizacija — nalaženje (nastavak)

Napomena. Ako je $r_{ii} \neq 0$, za $i = 1, \ldots, n-1$ (bez n), onda iz prethodnih relacija možemo

- izračunati sve netrivijalne elemente matrica L i R.

Drugim riječima,

- imamo egzistenciju i jedinstvenost matrica L i R.

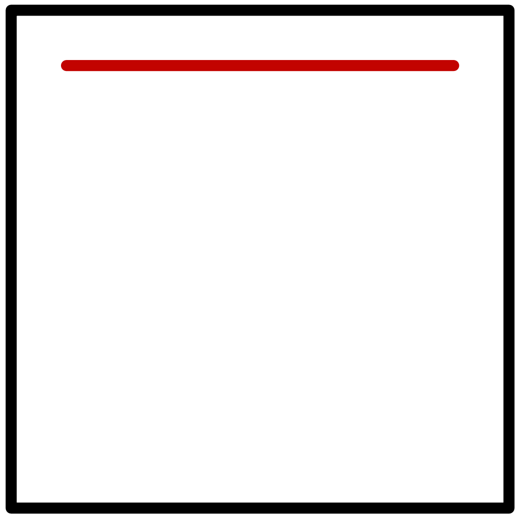
Primijetite da $r_{nn} \neq 0$ treba samo za povratnu supstituciju.

Pitanje: Kojim se redom računaju elementi od L i R?

- Može točno prema prethodnim relacijama (v. slikice), ali
- neke elemente smijemo računati i kasnije — za efikasno korištenje tzv. cache memorije (granice i poredak petlji).

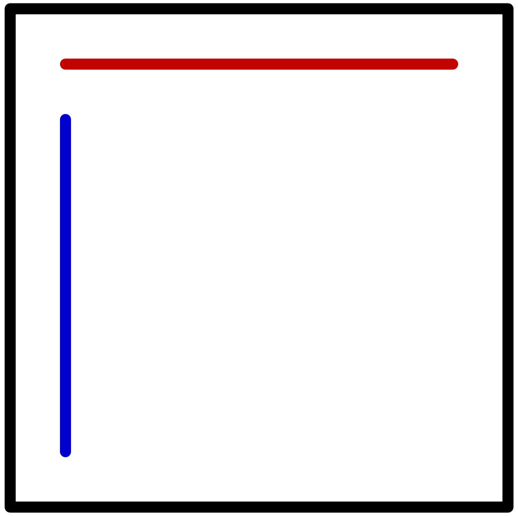
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



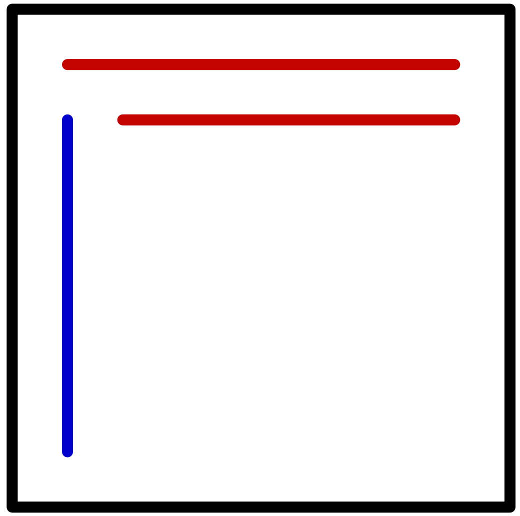
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



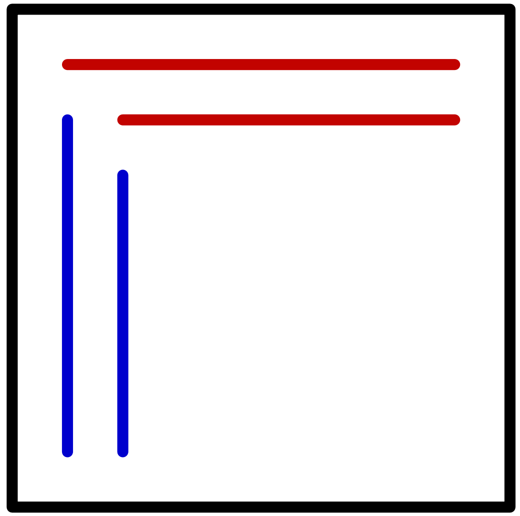
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



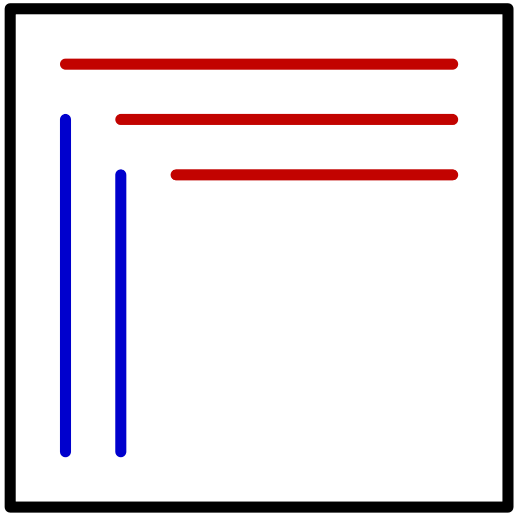
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



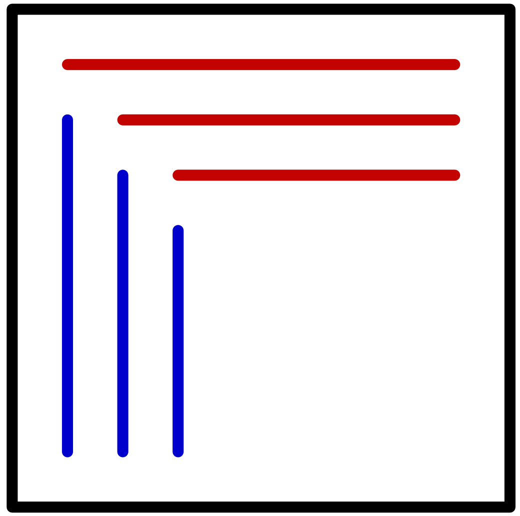
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



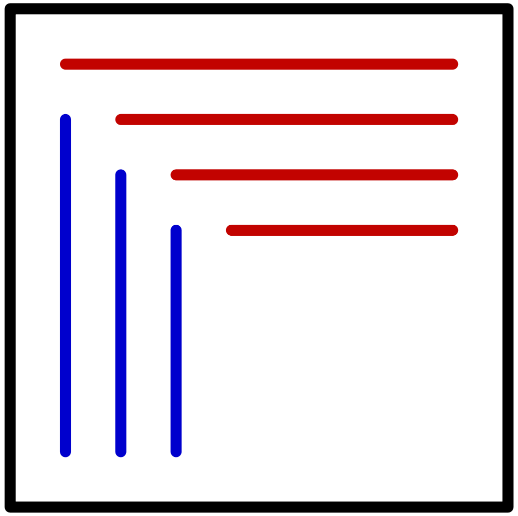
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



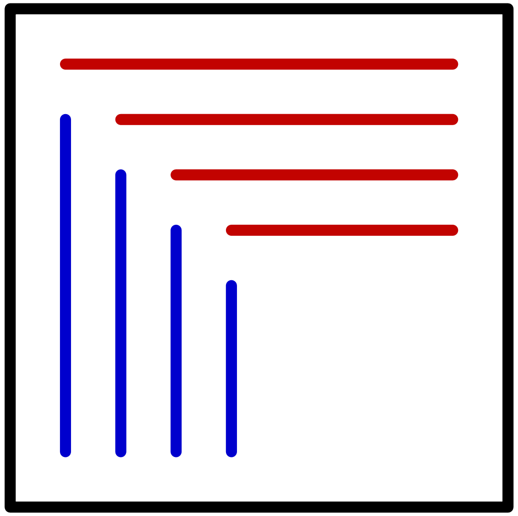
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



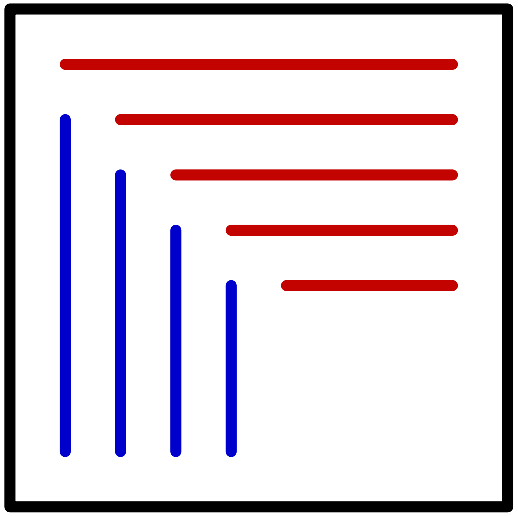
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



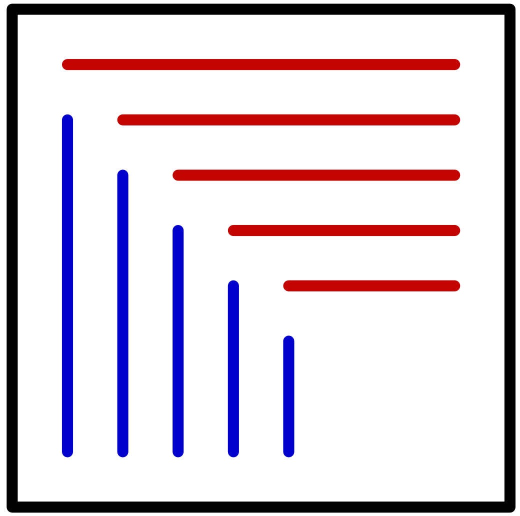
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



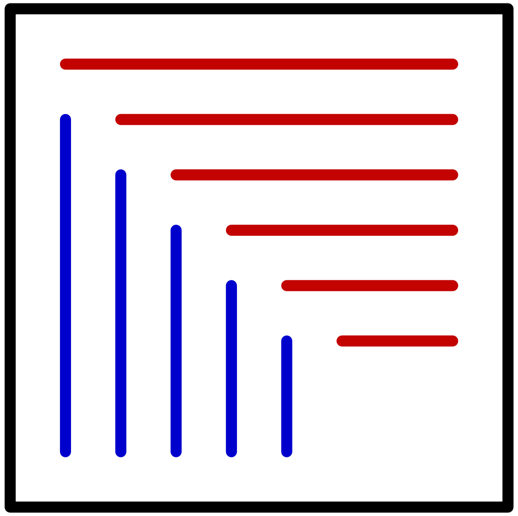
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



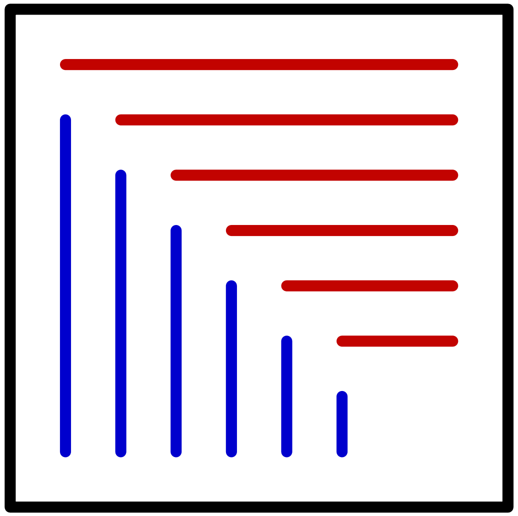
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



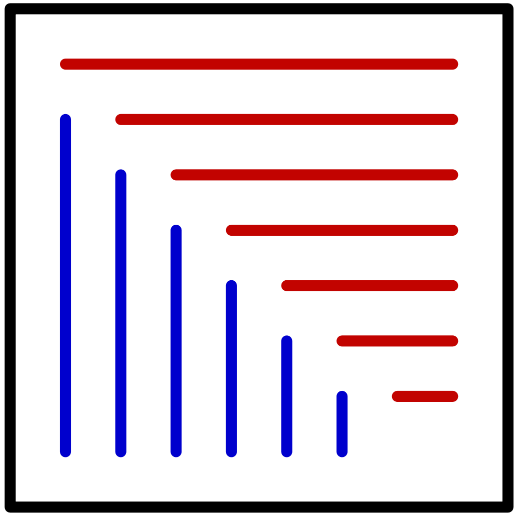
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



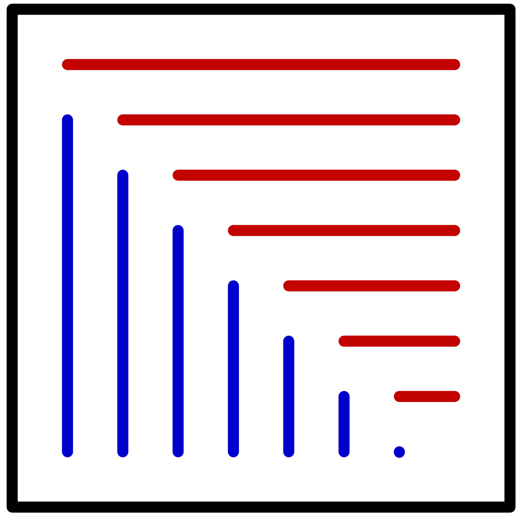
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



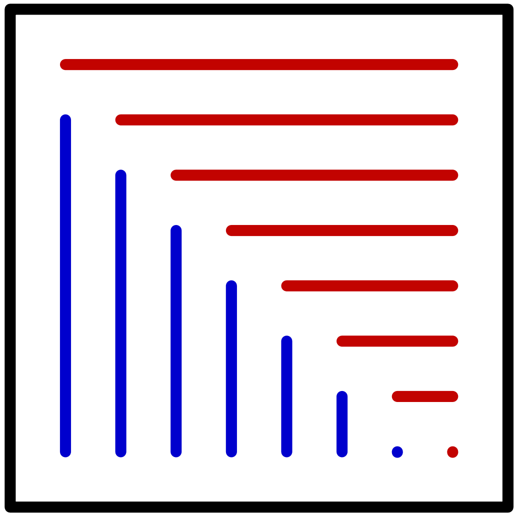
LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



LR faktorizacija — poredak nalaženja

Poredak računanja elemenata — plavo za L i crveno za R:



LR faktorizacija — spremanje elemenata

Uobičajeno se LR faktorizacija matrice A izvodi tako da se njezina "radna kopija" = neko polje u memoriji računala,

- koje, na početku, sadrži matricu A,
- postupno uništava i prepisuje elementima matrica L i R

na sljedeći način:

- elementi matrice R spremaju se u gornjem trokutu i na dijagonali,
- elementi matrice L spremaju se u donjem trokutu, s tim da se dijagonala matrice L ne sprema (znamo da su 1).

Redosljed spremanja — kao na prošlim slikama, ili drugačije (ovisno o granicama i poretku petlji).

Digresija — “Matlab” oznake za podmatrice

Ostaje još vidjeti uz koje uvjete na matricu A vrijedi $r_{ii} \neq 0$, za $i = 1, \ldots, n-1$.

Za iskaz teorema, korisno je uvesti tzv. Matlab oznake za one podmatrice matrice A, koje se dobivaju na presjeku redaka i stupaca, s indeksima u zadanim rasponima (oblika “od : do”).

- $A(i:j, k:\ell)$ = podmatrica od A na presjeku redaka, od i-tog do j-tog, i stupaca, od k-tog do ℓ-tog.
  Tip ove podmatrice je $(j-i+1) \times (\ell-k+1)$.
- Ako za raspon napišemo samo “ $:$ ”, podrazumijevaju se svi dozvoljeni indeksi, od prvog do zadnjeg iz A.

Definiramo još i apsolutnu vrijednost matrice A, u oznaci $|A|$. To je matrica istog tipa kao i A, čiji elementi su apsolutne vrijednosti elemenata od A, tj. $(|A|)_{ij} = |a_{ij}|$, za sve i, j.

Digresija — Blok–matrice i operacije

Za skraćeni zapis, matricu A možemo podijeliti na blokove ili podmatrice — vodoravnim i okomitim "crtama", kao na slici

$$A = \left[\begin{array}{c|c|c|c} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1q} \\ \hline A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2q} \\ \hline \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \hline A_{p1} & A_{p2} & \cdots & A_{pq} \end{array}\right],$$

gdje su A_{ij}, općenito, pravokutne matrice.

Kad imamo dvije matrice A i B, podijeljene u blokove, onda se matrične operacije $+$ i $\cdot$ "po blokovima" rade isto kao i po elementima, uz uvjet da su operacije korektno definirane za pripadne blokove, tj. da ti blokovi imaju odgovarajući tip.

Digresija — Blok–matrice i operacije (nastavak)

Primjer. Neka su A i B kvadratne matrice reda n, s istom podjelom na blokove, tj. blokovi A_{ij} i B_{ij} su istog tipa,

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}.$$

Ako u produktu $C = A \cdot B$ napravimo istu podjelu na blokove, onda za blokove C_{ij} vrijedi ista formula kao i “po elementima”

$$C_{ij} = \sum_{k=1}^{2} A_{ik} \cdot B_{kj}, \quad i, j = 1, 2.$$

Napomena. Ovo koristimo u dokazu teorema. Dodatno, kad je blok A_{11} reda $n-1$, onda blok A_{12} pišemo kao vektor (v), blok A_{21} kao transponirani vektor (w^T), a “blok” A_{22} je skalar a_{nn}.

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

Teorem. Postoji jedinstvena LR faktorizacija matrice A ako i samo ako su vodeće glavne podmatrice $A_k := A(1:k, 1:k)$ regularne, za $k = 1, \ldots, n-1$.

Ako je A_k singularna za neki k, faktorizacija može postojati, ali onda sigurno nije jedinstvena (v. primjere na kraju dokaza).

Dokaz. Za prvi smjer, pretpostavimo da su sve podmatrice A_k regularne, za $k = 1, \ldots, n-1$. Konstrukcija LR faktorizacije za $A = A_n$ napreduje induktivno po dimenziji k.

Baza indukcije: Za $k = 1$, uvijek postoji jedinstvena LR faktorizacija

$$A_1 = [1]\,[a_{11}].$$

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

Korak indukcije: Pretpostavimo da je $k > 1$ i da podmatrica A_{k-1} ima jedinstvenu LR faktorizaciju $A_{k-1} = L_{k-1} R_{k-1}$.

Tražimo LR faktorizaciju podmatrice A_k, gdje je

$$A_k = \begin{bmatrix} A_{k-1} & b \\ c^T & a_{kk} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{k-1} & 0 \\ \ell^T & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{k-1} & r \\ 0 & r_{kk} \end{bmatrix} := L_k R_k.$$

Množenjem dobivamo da moraju vrijediti sljedeće jednadžbe

$$L_{k-1} r = b, \quad R_{k-1}^T \ell = c, \quad a_{kk} = \ell^T r + r_{kk}.$$

Matrice L_{k-1} i R_{k-1} su regularne, pa postoje jedinstvena rješenja prva dva sustava — vektori r, ℓ. Iz zadnje jednadžbe dobivamo da je onda i r_{kk} jedinstven. Dakle, vrijedi i za A_k.

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

Obrat. Pretpostavimo da matrica A ima jedinstvenu LR faktorizaciju $A = LR$ i označimo

$$L_k := L(1:k, 1:k), \quad R_k := R(1:k, 1:k), \quad k = 1, \ldots, n.$$

Onda je, raspisom kao na prethodnoj stranici, za $k = n$

$$A = \begin{bmatrix} A_{n-1} & b \\ c^T & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{n-1} & 0 \\ \ell^T & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R_{n-1} & r \\ 0 & r_{nn} \end{bmatrix} := L\, R.$$

Množenjem dobivamo da onda vrijede sljedeće četiri jednadžbe

$$A_{n-1} = L_{n-1}\, R_{n-1}, \qquad \begin{aligned} L_{n-1} r &= b, \\ R_{n-1}^T \ell &= c, \end{aligned} \qquad a_{nn} = \ell^T r + r_{nn}.$$

Sad iskoristimo jedinstvenost matrica L i R u faktorizaciji.

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

To znači da vektor ℓ mora biti jedinstveno rješenje sustava

$$R_{n-1}^T \ell = c,$$

pa matrica R_{n-1} mora biti regularna, tj. vrijedi

$$\det R_{n-1} = r_{11}\, r_{22} \cdots r_{n-1,n-1} \neq 0.$$

Iz strukture matrica L i R (rastavom unatrag) vidimo da je $A_k = L_k\, R_k$, za sve $k = 1, \ldots, n-1$, pa je $\det A_k = \det R_k$. Iz regularnosti R_{n-1} onda slijedi

$$\det A_k = \det R_k = r_{11}\, r_{22} \cdots r_{kk} \neq 0, \quad k = 1, \ldots, n-1.$$

Dakle, sve podmatrice A_k su regularne, za $k = 1, \ldots, n-1$.

Samo zadnja matrica $A_n = A$ može biti singularna ($r_{nn} = 0$).

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

Primjer singularne matrice A za koju postoji LR faktorizacija, ali nije jedinstvena:

$$A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \ell_{21} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Ovdje je $A_1 = R_1 = 0$, sustav za ℓ_{21} je $0 \cdot \ell_{21} = 0$ (u skladu s prethodnim dokazom), pa element ℓ_{21} može biti bilo što.

S druge strane, matrica

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

nema LR faktorizaciju, iako je regularna (fali pivotiranje). Sustav za ℓ_{21} ovdje glasi $0 \cdot \ell_{21} = 1$ i nema rješenja. ■

Gaussove eliminacije i LR faktorizacija

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

Može se pokazati da je

- matrica R dobivena LR faktorizacijom jednaka
- matrici R dobivenoj Gaussovim eliminacijama.

Neka je, kao ranije,

- $A^{(k)}$ matrica na početku k-tog koraka Gaussovih eliminacija,
- a $A^{(k+1)}$ matrica dobivena na kraju tog koraka.

Onda se $A^{(k+1)}$ može matrično napisati kao produkt

$$A^{(k+1)} = M_k A^{(k)},$$

pri čemu matrica "transformacije" M_k ima sljedeći oblik ...

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

$$
M_k = \left[\begin{array}{c|ccccc}
I_{k-1} & & & & & \\
\hline
 & 1 & & & & \\
 & -m_{k+1,k} & 1 & & & \\
 & -m_{k+2,k} & & \ddots & & \\
 & \vdots & & & \ddots & \\
 & -m_{n,k} & & & & 1
\end{array}\right].
$$

Matrica I_{k-1} je jedinična matrica reda $k-1$, a m_{ik} su odgovarajući multiplikatori u k-tom koraku eliminacija.

Na kraju eliminacija, nakon $n-1$ koraka, dobijemo gornju trokutastu matricu

$$
\widetilde{R} := A^{(n)} = M_{n-1}\, M_{n-2} \cdots M_1\, A.
$$

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

Sve matrice M_k su regularne, jer su M_k donje trokutaste s 1 na dijagonali, pa postoje njihovi inverzi. Onda se A može napisati kao

$$A = M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1} \widetilde{R} := \widetilde{L}\widetilde{R},$$

gdje je

$$\widetilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ m_{21} & 1 & & & \\ \vdots & m_{32} & \ddots & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}.$$

Iz jedinstvenosti LR faktorizacije slijedi da je $\widetilde{R} = R$. Usput, slijedi i $\widetilde{L} = L$, pa imamo vezu matrice L s multiplikatorima.

Parcijalno pivotiranje u LR faktorizaciji

Veza LR faktorizacije i Gaussovih eliminacija upućuje nas da pivotiranje vršimo na isti način kao kod Gaussovih eliminacija.

Ako koristimo parcijalno pivotiranje, onda se LR faktorizacija tako dobivene matrice — permutiranih redaka, zapisuje kao

$$PA = LR,$$

pri čemu je P matrica permutacije.

Matrica permutacije P u svakom retku i stupcu

- ima točno jednu jedinicu, a ostalo su nule.

P je uvijek regularna matrica, čak ortogonalna — pokažite to! Zato P ima inverz i vrijedi $P^{-1} = P^T$.

Parcijalno pivotiranje u LR faktorizaciji

Ako znamo "permutiranu" faktorizaciju $PA = LR$, kako ćemo riješiti linearni sustav $Ax = b$?

Najjednostavnije je lijevu i desnu stranu (slijeva) pomnožiti s P, pa dobivamo

$$PAx = LRx = Pb.$$

Dakle, u prvom koraku rješavamo sustav $Ly = Pb$.

Oprez: kad permutiramo, istovremeno zamjenjujemo retke

- u obje "radne matrice" u polju — to su $(L - I)$ i R,

tj. permutiramo dosadašnje multiplikatore i jednadžbe.

Kako realiziramo permutacije u algoritmu?

Parcijalno pivotiranje u LR faktorizaciji

Realizacija permutacija:

- Fizički zamjenjujemo retke u radnoj matrici A, u kojoj formiramo L i R,
  - $L - I$ u strogo donjem trokutu od A,
  - R u gornjem trokutu od A.
- Moramo pamtiti permutaciju P, zbog naknadne permutacije desne strane — vektora b.
- Matrica P se pamti kao vektor p, koji na mjestu i ima
  - indeks stupca j, gdje se nalazi jedinica u i-tom retku od P, tj.

$$p[i] = j \iff P_{ij} = 1.$$

Za velike matrice — može i bez zamjena, dovoljan je vektor p.

Parcijalno pivotiranje u LR faktorizaciji

Primjer. Ako u LR faktorizaciji sustava s 3 jednadžbe

- prvo zamijenimo prvi i treći redak,
- pa onda trenutni drugi i treći redak,

onda će se matrica P, odnosno, vektor p mijenjati ovako:

$$P: \quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},$$

$$p: \quad \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Potpuno pivotiranje u LR faktorizaciji

Ako koristimo potpuno pivotiranje, dobivamo LR faktorizaciju matrice koja ima permutirane retke i stupce obzirom na A, tj.

$$PAQ = LR,$$

gdje su P i Q matrice permutacije (P za retke, Q za stupce).

Rješenje sustava $Ax = b$ dobivamo kao i prije — iz $PAx = Pb$.

Q je ortogonalna, pa je $PA = LRQ^T$. Uz pokratu $Q^T x = z$, imamo

$$PAx = LR(Q^T x) = LRz = Pb.$$

Dakle, jedina razlika obzirom na parcijalno pivotiranje je:

- na kraju treba "izokretati" rješenje z, da se dobije x, tj. $x = Qz$.

Perturbacije linearnih sustava i uvjetovanost matrice

Teorija perturbacije linearnih sustava

Teorija perturbacije linearnih sustava bavi se ocjenom (po elementima i/ili po normi) koliko se najviše promijeni rješenje sustava x, ako se malo promijene elementi od A i/ili b.

Problem. Neka je

$$Ax = b,$$

gdje je $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ regularna matrica, a b zadani vektor.

Zanima nas koliko će se najviše promijeniti rješenje x ovog problema, ako perturbiramo A, odnosno, b. Za ovaj problem

- ulazni podaci su elementi od A i b — njih $n^2 + n$,
- a rezultat je vektor $x \in \mathbb{F}^n$.

U općem obliku problema, ulaznih podataka je puno.

Koliko je dobro uvjetovan linearni sustav?

Zato, pojednostavnimo problem i pretpostavimo da je

- A "fiksna" matrica (ne varira),
- a dozvoljene su perturbacije samo vektora b (on varira).

Pripadna funkcija problema je onda $f_A : \mathbb{F}^n \to \mathbb{F}^n$, uz

$$x = f_A(b) := A^{-1}b.$$

Iskoristimo ranije rezultate — samo, umjesto x, y, pišemo b, x.

U grubljoj analizi gledamo relativne perturbacije "po normi", a relativna uvjetovanost problema je

$$(\mathrm{cond}\, f_A)(b) := \frac{\|b\|}{\|f_A(b)\|} \cdot \left\| \frac{\partial f_A}{\partial b} \right\|.$$

Koliko je dobro uvjetovan linearni sustav?

Funkcija problema $f_A(b) = A^{-1}b$ je linearna, pa je Jacobijeva matrica te funkcije

$$\frac{\partial x}{\partial b} = \frac{\partial f_A}{\partial b} = J_{f_A}(b) = A^{-1}.$$

Onda je

$$(\mathrm{cond}\, f_A)(b) = \frac{\|b\| \cdot \|A^{-1}\|}{\|A^{-1}b\|} = \frac{\|Ax\| \cdot \|A^{-1}\|}{\|x\|}.$$

Nađimo najgoru moguću relativnu uvjetovanost sustava, po svim vektorima b — u bilo kojoj operatorskoj normi $\|\ \|$:

$$\max_{\substack{b \in \mathbb{F}^n \\ b \neq 0}} (\mathrm{cond}\, f_A)(b) = \max_{\substack{x \in \mathbb{F}^n \\ x \neq 0}} \frac{\|Ax\|}{\|x\|} \cdot \|A^{-1}\| = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|.$$

Uvjetovanost matrice

Dobili smo broj koji ovisi samo o matrici A.

Definicija. Broj uvjetovanosti ili uvjetovanost matrice A je

$$\text{cond}(A) = \kappa(A) := \|A\| \cdot \|A^{-1}\|.$$

U ovoj definiciji, norma može biti bilo koja matrična norma, a najčešće se koriste operatorske norme.

Oznaka norme = uvjetovanost dobije indeks norme. Na pr.

$$\text{cond}_2(A) = \kappa_2(A) := \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2.$$

Napomena. Kao mjera uvjetovanosti linearnog sustava, uvjetovanost matrice je dostižna u operatorskim normama, tj.

- postoji desna strana b za koju je $(\text{cond}\, f_A)(b) = \text{cond}(A)$.

Osnovna svojstva uvjetovanosti matrice

Za regularne matrice, u bilo kojoj operatorskoj normi vrijedi

$$1 = \|I\| = \|A \cdot A^{-1}\| \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| = \mathrm{cond}(A).$$

Zato kažemo da je A loše uvjetovana ako je $\mathrm{cond}(A) \gg 1$. ■

Posebno, u unitarno invarijantnoj 2-normi vrijedi

$$1 \leq \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \mathrm{cond}_2(A),$$

a jednakost se dostiže za unitarne matrice A i za αA.

Dodatno, za bilo koje dvije unitarne matrice U i V vrijedi

$$\mathrm{cond}_2(UAV) = \mathrm{cond}_2(A),$$

jer su inverzi $U^{-1} = U^*$ i $V^{-1} = V^*$, opet, unitarne matrice. ■

Perturbacije linearnih sustava (nastavak)

Još malo o perturbacijama linearnih sustava

Ocjenu koliko se najviše promijenilo rješenje sustava $Ax = b$,

- ako perturbiramo samo b ili samo A,
- ako perturbiramo i A i b,

možemo dobiti direktno — po normi i po elementima.

U nastavku, gledamo samo relativne perturbacije po normi.

Razumna pretpostavka: perturbacije Δb vektora b, odnosno, ΔA matrice A, su relativno, po normi, odozgo ograđene nekim brojem ε, tj. vrijedi

$$\|\Delta b\| \leq \varepsilon \|b\|, \quad \|\Delta A\| \leq \varepsilon \|A\|.$$

Komentar. Ako je ε točnost računanja, tolika perturbacija je napravljena već pri spremanju elemenata od b ili A u računalo.

Perturbacija vektora b

Za početak, pretpostavimo da smo perturbirali samo vektor b i da za vektorsku normu perturbacije vektora b vrijedi

$$\|\Delta b\| \leq \varepsilon \|b\|.$$

Umjesto sustava $Ax = b$, onda rješavamo sustav

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

Od ovog sustava oduzmemo $Ax = b$, pa ostaje

$$A\,\Delta x = \Delta b.$$

Množenjem slijeva s A^{-1} dobivamo

$$\Delta x = A^{-1}\,\Delta b.$$

Uzmemo normu obje strane i desnu stranu ocijenimo odozgo.

Perturbacija vektora b (nastavak)

Korištenjem pretpostavke $\|\Delta b\| \leq \varepsilon \|b\|$, dobivamo

$$\begin{aligned}\|\Delta x\| \leq \|A^{-1}\| \, \|\Delta b\| \leq \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|b\| = \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|Ax\| \\ \leq \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|A\| \, \|x\| = \varepsilon \, \kappa(A) \, \|x\|,\end{aligned}$$

pri čemu je $\kappa(A) = \|A\| \, \|A^{-1}\|$ uvjetovanost matrice A.

To pokazuje da je pogreška u rješenju (relativno, po normi)

- proporcionalna uvjetovanosti matrice A.

Korektno bi bilo dodati "u najgorem slučaju po b", jer imamo ocjenu odozgo, ali se ona može dostići.

Ovaj rezultat odgovara ranijem za relativnu uvjetovanost po normi — na temelju kojeg smo definirali uvjetovanost matrice.

Perturbacija matrice A

Pretpostavimo da smo perturbirali samo matricu A i da za operatorsku normu perturbacije vrijedi

$$\|\Delta A\| \leq \varepsilon \|A\|.$$

Umjesto sustava $Ax = b$, onda rješavamo sustav

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

Od ovog sustava oduzmemo $Ax = b$, pa ostaje

$$A\, \Delta x + \Delta A\, (x + \Delta x) = 0.$$

Množenjem slijeva s A^{-1} i sređivanjem dobivamo

$$\Delta x = -A^{-1}\, \Delta A\, (x + \Delta x).$$

Uzmemo normu obje strane i desnu stranu ocijenimo odozgo.

Perturbacija matrice A (nastavak)

Korištenjem pretpostavke $\|\Delta A\| \leq \varepsilon \|A\|$, dobivamo

$$\begin{aligned}\|\Delta x\| &\leq \|A^{-1}\| \, \|\Delta A\| \, \|x + \Delta x\| \leq \varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|A\| \, \|x + \Delta x\| \\ &\leq \varepsilon \, \kappa(A) \, (\|x\| + \|\Delta x\|).\end{aligned}$$

Na lijevu stranu prebacimo sve članove koji sadrže Δx. Izlazi

$$(1 - \varepsilon \, \kappa(A)) \, \|\Delta x\| \leq \varepsilon \, \kappa(A) \, \|x\|.$$

Ako je $\varepsilon \, \kappa(A) < 1$, a to znači da je i $\|\Delta A\| \, \|A^{-1}\| < 1$, onda je

$$\|\Delta x\| \leq \frac{\varepsilon \, \kappa(A)}{1 - \varepsilon \, \kappa(A)} \, \|x\|,$$

pa je pogreška u rješenju (relativno, po normi)

- približno proporcionalna uvjetovanosti matrice A.

Perturbacija matrice A i vektora b

Kad perturbiramo A i b — zbrojimo ranije ocjene. Poopćenje:

Teorem (v. Higham, ASNA2). Neka je $Ax = b$ i neka je

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

gdje je

$$\|\Delta A\| \leq \varepsilon\,\|E\|, \quad \|\Delta b\| \leq \varepsilon\,\|f\|,$$

pri čemu je E neka matrica, a f neki vektor. Također, neka je

$$\varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|E\| < 1.$$

Tada, za $x \neq 0$, vrijedi ocjena

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon\,\|A^{-1}\|\,\|E\|} \left(\frac{\|A^{-1}\|\,\|f\|}{\|x\|} + \|A^{-1}\|\,\|E\| \right).$$

Perturbacija matrice A i vektora b (nastavak)

Komentar. Uobičajeno se za E uzima A, jer je to pogreška koju napravimo spremanjem matrice A u računalo. Jednako tako, za f se obično uzima b. U tom slučaju je

$$\begin{aligned}
\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} &\leq \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon\, \|A^{-1}\|\, \|A\|} \left(\frac{\|A^{-1}\|\, \|b\|}{\|x\|} + \|A^{-1}\|\, \|A\| \right) \\
&= \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon\, \kappa(A)} \left(\frac{\|A^{-1}\|\, \|Ax\|}{\|x\|} + \kappa(A) \right) \\
&\leq \frac{\varepsilon}{1 - \varepsilon\, \kappa(A)} \left(\frac{\|A^{-1}\|\, \|A\|\, \|x\|}{\|x\|} + \kappa(A) \right) \\
&= \frac{2\varepsilon\, \kappa(A)}{1 - \varepsilon\, \kappa(A)}.
\end{aligned}$$

Perturbacija matrice A i vektora b (nastavak)

Dokaz (skica). Provodi se na sličan način kao za pojedinačne perturbacije vektora b, odnosno, matrice A.

Od $(A + \Delta A)\,(x + \Delta x) = b + \Delta b$ oduzmemo $Ax = b$, pa ostaje

$$A\,\Delta x = \Delta b - \Delta A\,x - \Delta A\,\Delta x.$$

Množenjem s A^{-1} slijeva, a zatim korištenjem svojstava operatorskih normi, s malo truda, izlazi traženo. ∎

Malo kompliciranije, mogu se dobiti i ocjene za perturbacije po elementima. Na primjer, uz pretpostavke da je

$$|\Delta A| \leq \varepsilon\,|E|, \quad |\Delta b| \leq \varepsilon\,|f|,$$

gdje je E neka matrica, a f neki vektor (v. Higham, ASNA2). Nejednakost za matrice $\Leftrightarrow$ vrijedi po elementima, za svaki.

Komentar rezultata teorije perturbacija

Uočimo da sve ocjene vrijede

- samo za "dovoljno male" perturbacije matrice A.

U općem teoremu, za relativne perturbacije po normi, mora biti

$$\varepsilon \, \|A^{-1}\| \, \|E\| < 1, \quad \text{odnosno,} \quad \varepsilon \, \kappa(A) < 1.$$

Druga relacija se dobiva za $E = A$.

U protivnom, ocjena ne vrijedi (nazivnik nula ili krivi znak),

- tj. relativna greška (po normi) može biti po volji velika.

Pitanje: Što kaže obratna analiza grešaka zaokruživanja, tj.

- koje su ocjene na perturbacije, kad računamo približno?

Odgovor na to — malo kasnije (sljedeće predavanje).

Primjer — loša uvjetovanost

Primjer. Na prvom predavanju imali smo primjer sustava

$$\begin{aligned} 2\,x_1 \;+\; 6\,x_2 \qquad\quad &= 8 \\ 2\,x_1 \;+\; 6.0001\,x_2 &= 8.0001, \end{aligned}$$

s rješenjem $x_1 = 1$, $x_2 = 1$, i malo perturbiranog sustava

$$\begin{aligned} 2\,x_1 \;+\; 6\,x_2 \qquad\quad &= 8 \\ 2\,x_1 \;+\; 5.99999\,x_2 &= 8.00002. \end{aligned}$$

s rješenjem $x_1 = 10$, $x_2 = -2$.

Ovdje je $\|\Delta A\|_2 < 10^{-4}\,\|A\|_2$ i $\|\Delta b\|_2 < 10^{-4}\,\|b\|_2$. Krivac za veliku perturbaciju u rješenju je loša uvjetovanost matrice A

$$\kappa_2(A) \approx 4.00006 \cdot 10^5.$$

Zato je $\|\Delta A\|_2\,\|A^{-1}\|_2 > 1$, pa ranija ocjena ne vrijedi.

Primjer — uvjetovanost i izračunato rješenje

Pitanje: Ako je uvjetovanost matrice mala, mora li onda rješenje izračunato računalom biti dobro?

Primjer. Sjetimo se sustava $Ax = b$, gdje je

$$A = \begin{bmatrix} 0.0001 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Na tom sustavu smo pokazali korisnost zamjene jednadžbi.

Za vježbu izračunajte da je

$$\operatorname{cond}_2(A) = \frac{300000001 + 10001\sqrt{499980001}}{199980000} \approx 2.61839.$$

Dakle, ovo je dobro uvjetovan sustav.

Primjer (nastavak)

Međutim, u Gaussovim eliminacijama bez pivotiranja,

- u prethodnom sustavu je nešto "pošlo po zlu"! Što?

Na bitnom mjestu u računu došlo je do "underflow-a", tj.

- mali broj je pretvoren u nulu,

i više ne možemo govoriti o malim relativnim perturbacijama!

Za razliku od toga, s parcijalnim pivotiranjem

- nije bilo nikakvih problema — dobivamo malu grešku.

Dakle, ponašanje izračunatog rješenja bitno ovisi o algoritmu!

- Gdje se ta "razlika" vidi?

Završni komentar — perturbacije i algoritmi

Uočite još da pivotiranje ne mijenja uvjetovanost matrice A (bar u 2-normi), jer je

$$\mathrm{cond}_2(PAQ) = \mathrm{cond}_2(A).$$

Ključna razlika između algoritama s raznim matricama P i Q:

- različite PAQ imaju različite faktore L, R u $PAQ = LR$.
- Zato obratna analiza grešaka zaokruživanja daje bitno različite ocjene na perturbacije za razne algoritme!

Zadatak. Izračunajte $\kappa_2(A)$ i LR faktorizacije matrica PAQ, za sve moguće zamjene redaka P i zamjene stupaca Q, gdje je

$$A = \begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad |\varepsilon| < 1.$$