Numerička matematika
3. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Rješavanje linearnih sustava:
  - Gaussove eliminacije.
  - Zamjene jednadžbi (redaka) — parcijalno pivotiranje.
  - Zamjene redaka i stupaca — potpuno pivotiranje.
  - Gaussove eliminacije u praksi — LR (LU) faktorizacija.
  - Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije.

Informacije

Dva pitanja/prijedloga.

Petak 10. 4. je uskršnji — prijedlog "odrade":

- subota, 28. 3., od 11–14 u (003) ili (005).

Petak 17. 4. je tik ispred kolokvija — prijedlog "odrade":

- subota, 4. 4., od 11–14 u (003) ili (005).

Kolegij "Numerička matematika" ima demonstratora!

- Sonja Šimpraga — termin je četvrtkom, od 16–18.

Pogledajte oglas na oglasnoj ploči za dogovor.

Informacije — nastavak

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

http://web.math.hr/~singer/num_mat/

Skraćena verzija skripte — 1. dio (prvih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat1.pdf

Još će se skratiti za par dana!

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 7 tjedana):

http://web.math.hr/~singer/num_mat/num_mat2.pdf

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) i ne postoji, ili nije jedinstveno (koje od 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 $=$ 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

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

- 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

- "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 rješavanja 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 ekvivalentim 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 — komentari

Par komentara, prije 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 sustava ne treba pivotiranje,
- za vrpčaste, posebno trodijagonalne matrice, algoritam se drastično skraćuje (v. kubična spline interpolacija).

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

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

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.

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 jednadžba se 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 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 ispod dijagonale u k–tom stupcu matrice $A^{(k)}$.

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

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

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

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

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 $i = 1, \ldots, n-1$, 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 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 povratnom supstitucijom

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

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

Pitanje: Ako je A kvadratna i regularna,

- 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 sređujemo,

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

Odgovor: Ako dozvolimo pivotiranje

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

Objašnjenje: Ako u prvom stupcu nemamo ne-nula elemenata, matrica je singularna. Isto vrijedi i za svaki sljedeći korak (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)?

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).
- U praksi — kad računamo približno, to može dovesti do potpuno pogrešnog rezultata.

Jedna jedina operacija može upropastiti rezultat!

- Postoji u 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

$$x_1 = 1.\dot{0}00\dot{1}, \quad x_2 = 0.\dot{9}99\dot{8}.$$

Riješimo taj sustav "računalom" koje ima 4 decimalne znamenke mantise i 2 znamenke eksponenta.

Uočiti: Broj 0.0001 je "mali", ali nije nula. Po teoriji,

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

Gaussove eliminacije — primjer (nastavak)

Sustav zapisan u takvom "računalu" pamti se 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 niti 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"!

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Promijenimo li poredak jednadžbi, dobivamo

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

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

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

Ovdje nema oduzimanja — drugi broj s 10^{-4} je "zanemariv" prema 1. 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 $\varepsilon = 10^{-1}, \ldots, 10^{-25}$, Gaussovim eliminacijama bez zamjena i sa zamjenom poretka jednadžbi, u aritmetici računala.

Računanjem u najvećoj mogućoj preciznosti (`extended`) dobivamo sljedeću tablicu.

U tablici je x_2 naveden samo jednom — jer ga obje metode izračunaju jednako (i točno)!

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
	$\vdots$	$\vdots$	
-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

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

Pivotni element uobičajeno se bira korištenjem parcijalnog pivotiranja

- pivotni element je po apsolutnoj vrijednosti najveći u "ostatku" stupca — na glavnoj dijagonali ili ispod nje,

tj. ako je u k-tom koraku

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

onda ćemo zamijeniti r-ti i k-ti redak i 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 pomičnog zareza može doći do kraćenja najmanje značajnih znamenki $a_{ij}^{(k)}$, tako da izračunati $a_{ij}^{(k+1)}$ može imati veliku relativnu grešku.

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

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

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”.

Gaussove eliminacije s potpunim pivotiranjem

Osim parcijalnog pivotiranja, može se provoditi i potpuno pivotiranje. U k-tom koraku, bira se maksimalni 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 zamijeniti r-ti i k-ti redak, s-ti i k-ti stupac i početi korak eliminacije elemenata k-tog stupca.

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

Ovo nisu jedine mogućnosti pivotiranja kod rješavanja linearnih sustava.

Algoritam

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

```
/* Trokutasta redukcija */

za k = 1 do n - 1 radi {
  /* Nađi maksimalni |element| u ostatku stupca */
  max_elt = 0.0;
  ind_max = k;
  za i = k 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)

```
    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 */

/* Rješenje x izračunaj u b */
b[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] * b[j];
  };
  b[i] = sum / A[i, i];
};
```

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
  - $n - 1$ 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)

Ukupno, u k-tom koraku imamo

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

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

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

Druga suma se dobije se iz prve zamjenom indeksa $n-k\to k$.

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.

LR faktorizacija

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

$$A = LR,$$

pri čemu je

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

Matrica L je regularna, jer je $\det L = 1$, pa regularnost matrice A povlači i regularnost matrice R, jer je

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

LR faktorizacija (nastavak)

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

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

Prednost LR faktorizacije:

- 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 (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

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

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

LR faktorizacija (nastavak)

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

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

Dobivamo:

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

LR faktorizacija (nastavak)

Tako dobivamo rekurziju 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}.

LR faktorizacija (nastavak)

Ako je $r_{ii} \neq 0$ za $i = 1, \ldots, n-1$, onda iz prethodnih relacija

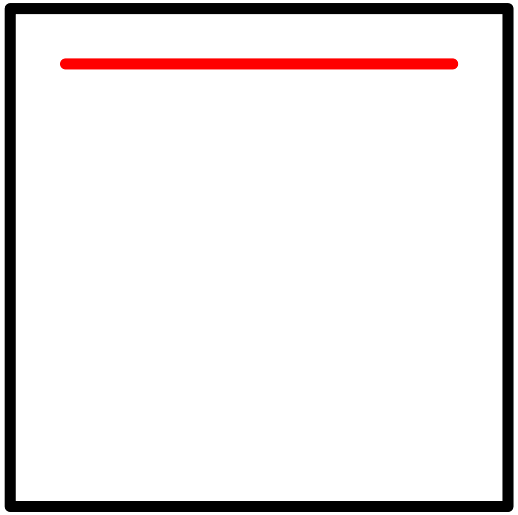
- možemo izračunati sve netrivijalne elemente matrica L i R,
- drugim riječima imamo egzistenciju i jedinstvenost matrica L i R.

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

Pitanje: Kojim se redom računaju elementi?

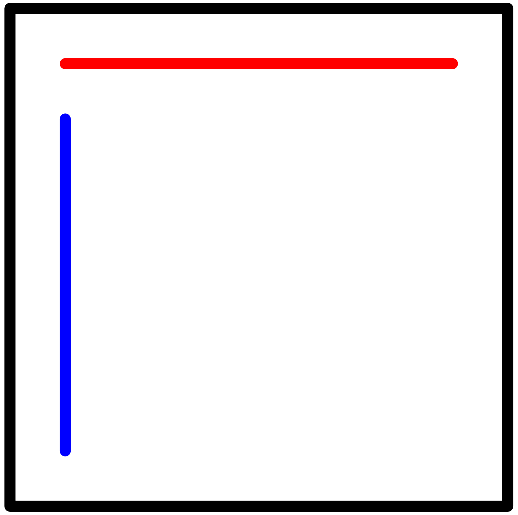
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



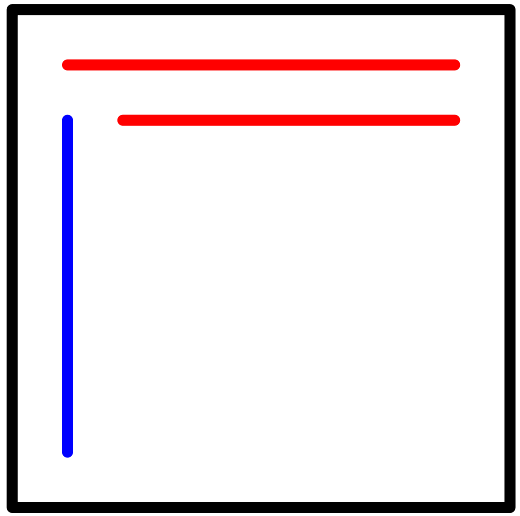
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



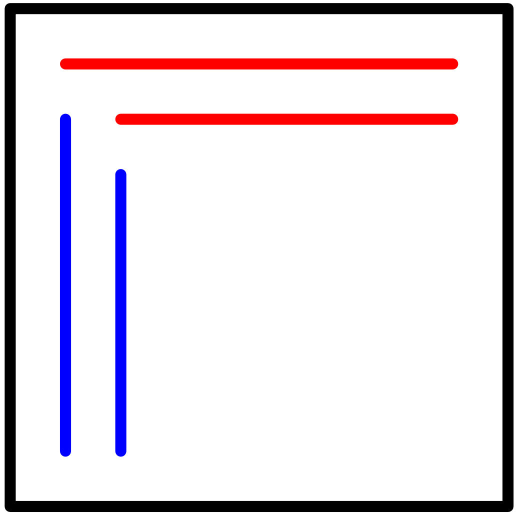
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



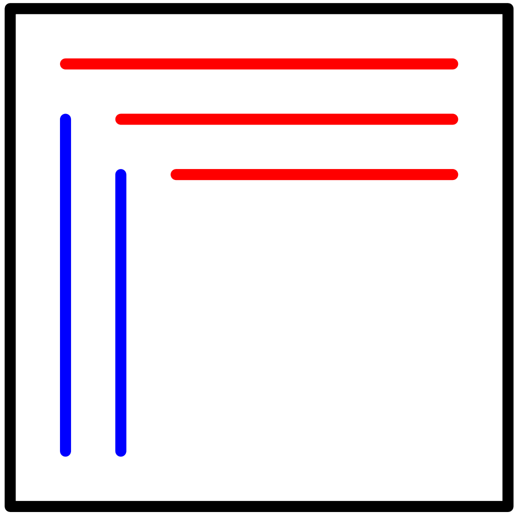
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



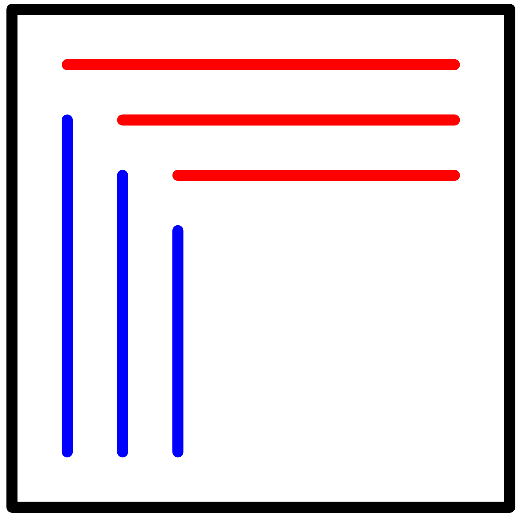
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



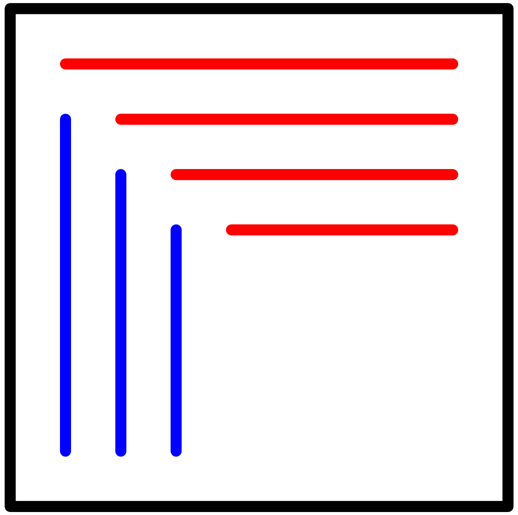
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



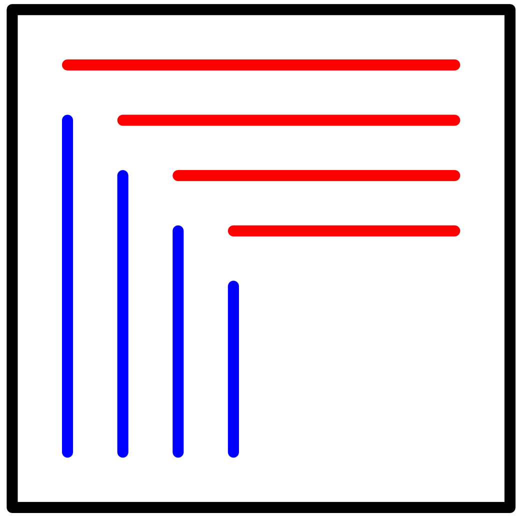
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



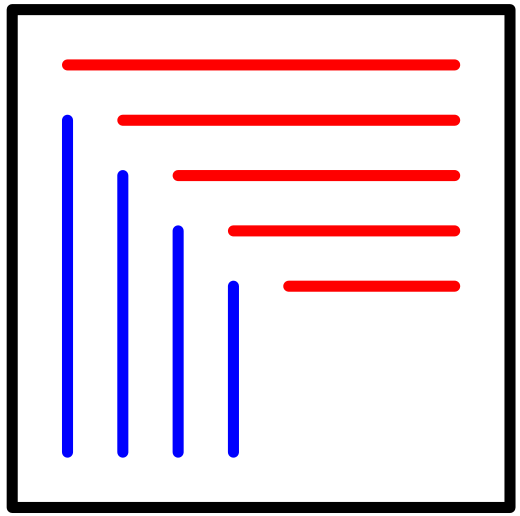
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



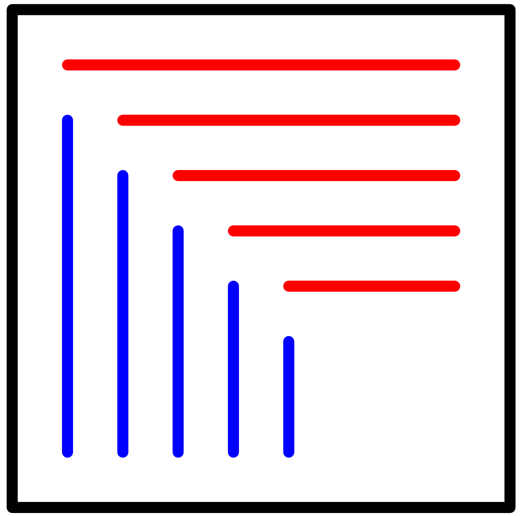
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



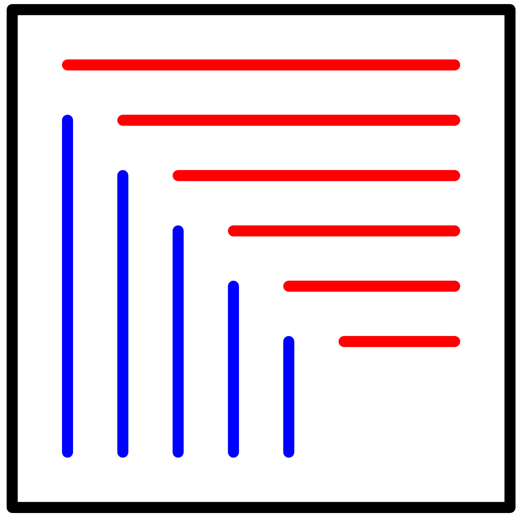
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



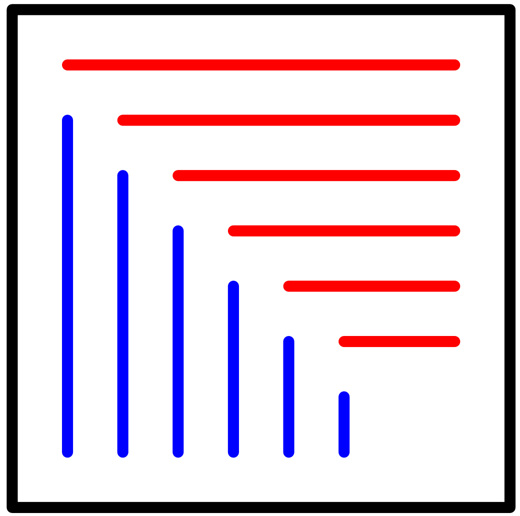
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



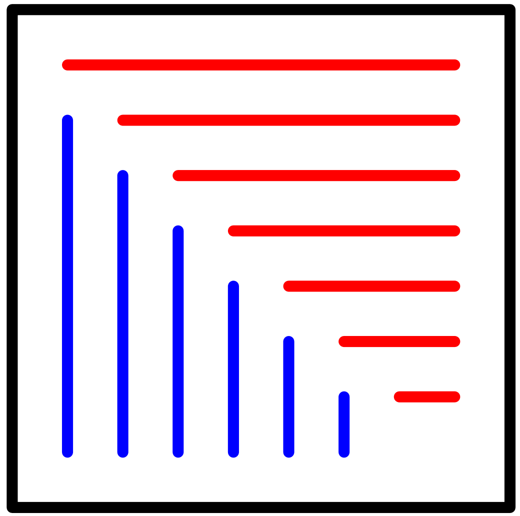
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



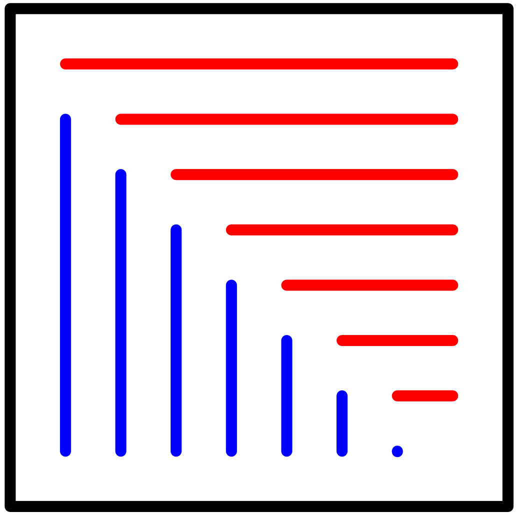
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



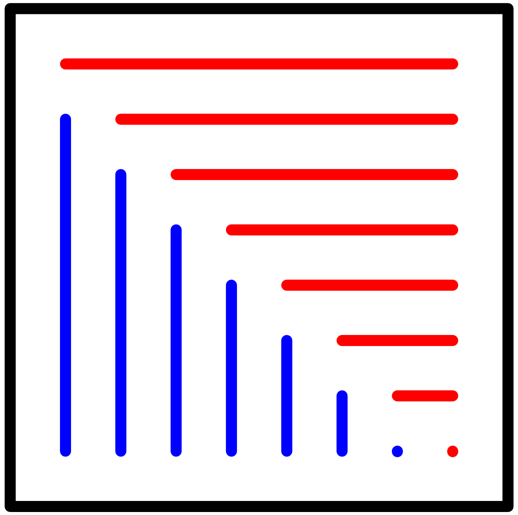
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



LR faktorizacija (nastavak)

Uobičajeno se LR faktorizacija matrice A izvodi tako da se njezina "radna kopija"

- 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.
- Redosljed spremanja — kao na prošlim slikama.

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

Ostaje vidjeti uz koje je uvjete $r_{ii} \neq 0$ za $i = 1, \ldots, n$.

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

Ako je A_k singularna za neki k, faktorizacija može postojati, ali nije jedinstvena.

Dokaz. Ide indukcijom po dimenziji matrice

Prvi smjer. Pretpostavimo da su sve podmatrice A_k regularne. Baza indukcije: Za $k = 1$, postoji jedinstvena LR faktorizacija

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

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

Korak indukcije: Pretpostavimo da A_{k-1} ima jedinstvenu faktorizaciju $A_{k-1} = L_{k-1}\, R_{k-1}$.

Tražimo faktorizaciju matrice A_k, gdje je

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

Da bi jednadžbe bile zadovoljene, množenjem dobivamo

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

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

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

Obrat: Pretpostavimo da je A nesingularna i postoji njezina LR faktorizacija. Tada je $A_k = L_k R_k$, za $k = 1, \ldots, n$. Zbog regularnosti A izlazi

$$\det A = \det R = r_{11} r_{22} \cdots r_{nn} \neq 0,$$

pa je $\det A_k = r_{11} r_{22} \cdots r_{kk} \neq 0$, tj. sve matrice A_k su regularne.

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

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

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

S druge strane, matrica

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

nema LR faktorizaciju, iako je regularna. ■

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

Može se pokazati da je

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

Neka je matrica

- $A^{(k)}$ dobivena u k-tom koraku Gaussovih eliminacija,
- a $A^{(k+1)}$ matrica iz sljedećeg koraka.

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

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

pri čemu je ...

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

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

a m_{ik} su odgovarajući multiplikatori.

Na kraju eliminacija, nakon n koraka, dobijemo trokutasti $\widetilde{R}$,

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

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

Svi M_k regularni, jer su M_k donje trokutaste s 1 na dijagonali, pa postoje njihovi inverzi.

A se 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 $\widetilde{R} = R$.