# *Numerička matematika*
# *4. predavanje*

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.hr/~singer

PMF – Matematički odjel, Zagreb

# Sadržaj predavanja

- Rješavanje linearnih sustava:
  - Pivotiranje u LR (LU) faktorizaciji.
  - Teorija perturbacije linearnih sustava.
  - Hilbertove matrice.
  - Uloga reziduala i iterativno poboljšanje rješenja.
  - Struktura LR (LU) faktorizacije.
  - Matrice za koje ne treba pivotiranje.
  - Simetrične pozitivno definitne matrice.
  - Faktorizacija Choleskog.
  - Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog.

# Informacije

Sljedeći petak nema nastave (Bush). Nadoknada sljedi …
Može li utorak, 8. 4., od 16–19?

Termin prvog kolokvija je:

- ponedjeljak, 28. 4., u 12 sati.

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

Materijale za predavanja doc. Grubišića možete naći na

`http://web.math.hr/~luka/indexh.html`

# 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

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

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 $\widetilde{R} = R$.

# 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 ima u svakom retku i stupcu ima točno jednu jedinicu, a ostalo su nule. $P$ je uvijek regularna matrica — pokažite to!

# Parcijalno pivotiranje u LR faktorizaciji

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

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

$$PAx = LRx = Pb.$$

Oprez: kad permutiramo, istovremeno zamjenjujemo retke i od $L$ i od $R$.

Kako realiziramo permutacije u algoritmu?

# Parcijalno pivotiranje u LR faktorizaciji

Realizacija permutacija:

- fizički zamjenjujemo retke u radnoj matrici $A$ u kojoj formiramo $L$ i $R$,
- moramo pamtiti permutaciju $P$ (zbog permutacije desne strane, $b$),
- $P$ se pamti kao vektor $p$ koji na mjestu $i$ ima indeks stupca gdje se nalazi jedinica u $i$-tom retku od $P$.

# Parcijalno pivotiranje u LR faktorizaciji

Primjer. Ako u LR faktorizaciji sustava s 3 jednadžbe zamijenimo

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

onda će se $P$, odnosno $p$ 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.

Skica rješenja. $Q$ je unitarna, pa iz $PA = LRQ^T$, uz pokratu $Q^T x = z$, imamo

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

što znači da je jedina razlika obzirom na parcijalno pivotiranje na kraju "izokretati" rješenje $x$.

# Parcijalno vs. potpuno pivotiranje

Možemo li i na temelju čega reći da je potpuno pivotiranje "bolje" od parcijalnog? Tradicionalno to se čini na temelju pivotnog rasta.

Pivotni rast (ili "faktor rasta") je omjer

- najvećeg (po apsolutnoj vrijednosti) elementa u svim koracima eliminacije,
- i najvećeg elementa u originalnoj matrici

$$\rho_n = \frac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}.$$

Intuitivno je jasno da nije dobro da elementi rastu po apsolutnoj vrijednosti, jer bi to moglo dovesti do gubitka točnosti.

# Pivotni rast

Koliki je pivotni rast kod parcijalnog pivotiranja?

Korištenjem relacija za poništavanje elemenata

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

za parcijalno pivotiranje vrijedi

$$|a_{ij}^{(k+1)}| \leq |a_{ij}^{(k)}| + |a_{kj}^{(k)}| \leq 2 \max_{i,j} |a_{ij}^{(k)}|.$$

Prethodna ocjena, za $n$ koraka algoritma daje pivotni rast $\rho_n^p$

$$\rho_n^p \leq 2^{n-1}.$$

## Pivotni rast

Već je J. Wilkinson primijetio da se taj pivotni rast može dostići za sve matrice oblika

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

Eksponencijalno rastu elementi posljednjeg stupca.

Ovo je samo "umjetno" konstruirani primjer, a u praksi je takvih matrica izrazito malo, pa se parcijalno pivotiranje ponaša mnogo bolje od očekivanog.

# *Pivotni rast*

Za potpuno pivotiranje pivotni rast $\rho_n^c$ može se ograditi odozgo s

$$\rho_n^c \leq n^{1/2}\left(2 \cdot 3^{1/2} \cdots n^{1/(n-1)}\right)^{1/2} \approx c\, n^{1/2}\, n^{(\log n)/4},$$

ali ta ograda nije dostižna. Ovo je dokazao J. H. Wilkinson, šezdesetih godina prošlog stoljeća.

Dugo se mislilo da vrijedi

$$\rho_n^c \leq n,$$

međutim nađeni su primjeri matrica kad to ne vrijedi. Kontraprimjer konstruiran 1991., matrice reda 13 ima pivotni rast $\rho_n^c = 13.0205$.

# 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 $A$ i/ili $b$.

Problem. Neka je

$$Ax = b,$$

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

Zanima nas koliko će se najviše promijeniti rješenje problema $x$ ako perturbiramo $A$, odnosno $b$.

- Pojednostavnimo problem i pretpostavimo da je $A$ fiksna matrica, a dozvoljene su perturbacije samo vektora $b$.

# Koliko je dobro uvjetovan linearni sustav?

Za prethodni problem

- ulazni podaci su elementi od $A$ i $b$ (njih $n^2 + n$), a rezultat je vektor $x \in \mathbb{F}^n$, a
- pripadna funkcija problema je $f : \mathbb{F}^n \to \mathbb{F}^n$ je

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

Iz prethodnog predavanja znamo da je relativna uvjetovanost problema (samo umjesto $x$ pišemo $b$)

$$\kappa_{\mathrm{rel}}(b) = (\mathrm{cond}\, f)(b) := \left| \frac{b f'(b)}{f(b)} \right|.$$

# Koliko je dobro uvjetovan linearni sustav?

Za višedimenzionalne probleme, da bismo dobili jedan broj u prethodnoj formuli, uzmemo normu, a derivacija je gradijent,

$$\nabla f(b) = A^{-1},$$

pa je

$$\kappa_{\mathrm{rel}}(b) = \frac{\|b\|_2 \|A^{-1}\|_2}{\|A^{-1}b\|_2} = \frac{\|Ax\|_2 \|A^{-1}\|_2}{\|x\|_2}.$$

Gledamo najgoru moguću uvjetovanost:

$$\max_{\substack{b \in \mathbb{F}^n \\ b \neq 0}} \kappa_{\mathrm{rel}}(b) = \max_{\substack{x \in \mathbb{F}^n \\ x \neq 0}} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} \|A^{-1}\|_2 = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2.$$

# Primjer

Za mjeru uvjetovanosti sustava, možemo uzeti:

$$\operatorname{cond} A := \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2.$$

Ako je uvjetovanost mala, mora li onda rješenje računalom biti dobro?

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

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

Za vježbu izračunajte da je

$$\operatorname{cond} A \approx 2.61838527365482686689.$$

# Primjer

Je li to dobro uvjetovan sustav? Jest!

Digresija. Nije teško pokazati da za regularne matrice vrijedi

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

a jednakost se dostiže za unitarne matrice. Uvjetovanost je loša ako je $\mathrm{cond}(A) \gg 1$. ■

U prethodnom sustavu je nešto pošlo po zlu? Što?

Na bitnom mjestu u računu došlo je do "underflow-a" (mali broj je pretvoren u nulu) i više ne možemo govoriti o malim relativnim perturbacijama.

# Hilbertova matrica

Primjer. Kod aproksimacije polinomima javljaju se linearni sustavi oblika

$$H_n x = b,$$

gdje je $H_n$ Hilbertova matrica reda $n$, tj.

$$H_n = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \cdots & \frac{1}{n} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{n+1} \\ \vdots & \cdots & & \vdots \\ \frac{1}{n} & \frac{1}{n+1} & \cdots & \frac{1}{2n-1} \end{bmatrix}.$$

# Hilbertova matrica

Da bismo ispitali točnost rješenja, stavimo

$$b(i) := \sum_{j=1}^{n} H_n(i,j),$$

tako da je rješenje sustava $x^T = [1, 1, \ldots, 1]$.

Što možemo očekivati od rješenja takvog sustava?

Pogled na Frobeniusovu normu matrice $A$ kaže da ona nije naročito velika, tj.

$$\|H_n\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{i=1}^{n}\left|\frac{1}{i+j-1}\right|} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{i=1}^{n} 1} = n.$$

# Hilbertova matrica

Međutim ... ne treba gledati samo normu matrice!!!
Uvjetovanost Hilbertovih matrica je vrlo visoka:

| $n$ | $\kappa_2(H_n)$ | $n$ | $\kappa_2(H_n)$ | $n$ | $\kappa_2(H_n)$ |
|---|---|---|---|---|---|
| 2 | $1.928 \cdot 10^{1}$ | 9 | $4.932 \cdot 10^{11}$ | 15 | $6.117 \cdot 10^{20}$ |
| 3 | $5.241 \cdot 10^{2}$ | 10 | $1.603 \cdot 10^{13}$ | 16 | $2.022 \cdot 10^{22}$ |
| 4 | $1.551 \cdot 10^{4}$ | 11 | $5.231 \cdot 10^{14}$ | 17 | $6.697 \cdot 10^{23}$ |
| 5 | $4.766 \cdot 10^{5}$ | 12 | $1.713 \cdot 10^{16}$ | 18 | $2.221 \cdot 10^{25}$ |
| 6 | $1.495 \cdot 10^{7}$ | 13 | $5.628 \cdot 10^{17}$ | 19 | $7.376 \cdot 10^{26}$ |
| 7 | $4.754 \cdot 10^{8}$ | 14 | $1.853 \cdot 10^{19}$ | 20 | $2.452 \cdot 10^{28}$ |
| 8 | $1.526 \cdot 10^{10}$ | | | | |

# *Hilbertova matrica* — $n = 2, 5$

Za sustav s Hilbertovom matricom, u `extended` točnosti, umjesto svih jedinica u rješenju, dobivamo:

Red 2

$$x(1) = 1.0000000000000000 \qquad x(2) = 1.0000000000000000$$

Red 5

$$x(1) = 1.0000000000000000 \qquad x(4) = 0.9999999999999990$$

$$x(2) = 0.9999999999999999 \qquad x(5) = 1.0000000000000005$$

$$x(3) = 1.0000000000000007$$

# *Hilbertova matrica* — $n = 10$

$$x(1) = 1.0000000000003436 \qquad x(6) = 0.9999999294831902$$
$$x(2) = 0.9999999999710395 \qquad x(7) = 1.0000001151701616$$
$$x(3) = 1.0000000006068386 \qquad x(8) = 0.9999998890931838$$
$$x(4) = 0.9999999945453735 \qquad x(9) = 1.0000000580638087$$
$$x(5) = 1.0000000258066880 \qquad x(10) = 0.9999999872591526$$

Uvjetovanost: $\approx 1.603 \cdot 10^{13}$.

# Hilbertova matrica — $n = 15$

$$
\begin{array}{ll}
x(1) = 1.000000000005406387 & x(9) = 1.0952919444304200 \\
x(2) = 0.9999999069805858 & x(10) = 0.8797820363884070 \\
x(3) = 1.0000039790948573 & x(11) = 1.0994671444236333 \\
x(4) = 0.9999257525660447 & x(12) = 0.9508102511158300 \\
x(5) = 1.0007543452271621 & x(13) = 1.0106027108940050 \\
x(6) = 0.9953234190795597 & x(14) = 1.0012346841153261 \\
x(7) = 1.0188643674562383 & x(15) = 0.9992252029377023 \\
x(8) = 0.9487142544341838 &
\end{array}
$$

Uvjetovanost: $\approx 6.117 \cdot 10^{20}$.

# *Hilbertova matrica* — $n = 20$

| | | | |
|---|---|---|---|
| $x(1) =$ | $1.000000048633302$9 | $x(11) =$ | $231.3608002738048500$ |
| $x(2) =$ | $0.9999865995557111$ | $x(12) =$ | $-60.5143391625873562$ |
| $x(3) =$ | $1.0008720556363132$ | $x(13) =$ | $-57.6674972682886125$ |
| $x(4) =$ | $0.9760210562677670$ | $x(14) =$ | $5.1760567992057506$ |
| $x(5) =$ | $1.3512820600312678$ | $x(15) =$ | $8.7242780841976215$ |
| $x(6) =$ | $-2.0883247796748707$ | $x(16) =$ | $210.1722288687690970$ |
| $x(7) =$ | $18.4001541798146106$ | $x(17) =$ | $-413.9544667202651170$ |
| $x(8) =$ | $-63.8982130462650081$ | $x(18) =$ | $349.7671855031355400$ |
| $x(9) =$ | $161.8392478869777220$ | $x(19) =$ | $-142.9134532513063250$ |
| $x(10) =$ | $-254.7902985140752950$ | $x(20) =$ | $25.0584794423327874$ |

Uvjetovanost $\approx 2.452 \cdot 10^{28}$.

# Hilbertova matrica

Recimo, $H_5^{-1}$ izgleda ovako:

$$H_5^{-1} = \begin{bmatrix} 25 & -300 & 1050 & -1400 & 630 \\ -300 & 4800 & -18900 & 26880 & -12600 \\ 1050 & -18900 & 79380 & -117600 & 56700 \\ -1400 & 26880 & -117600 & 179200 & -88200 \\ 630 & -12600 & 56700 & -88200 & 44100 \end{bmatrix}.$$

A kako tek izgledaju elementi $H_{20}^{-1}$?

## *Još malo o perturbacijama linearnih sustava*

Ocjenu koliko se najviše promijenilo rješenje sustava $Ax = b$ možemo dobiti i direktno i to po elementima/normi

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

Pretpostavimo da smo perturbirali samo $A$. Umjesto sustava $Ax = b$ tada rješavamo

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

Također, možemo pretpostaviti da za operatorsku normu perturbacije vrijedi

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

Komentar. Ako je $\varepsilon$ točnost računanja, tolika perturbacija napravljena već pri spremanju elemenata matrice u računalo.

# Perturbacija matrice $A$

Oduzimanjem $Ax = b$ od $(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b$ dobivamo

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

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

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

Uzimanjem norme lijeve i desne strane, a zatim ocjenjivanjem odozgo, dobivamo

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

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

# *Perturbacija matrice $A$*

Premještanjem na lijevu stranu svih pribrojnika koji sadrže $\Delta x$ dobivamo

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

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

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

što pokazuje da je pogreška u rješenju približno proporcionalna uvjetovanosti matrice $A$.

# Perturbacija vektora $b$

Pretpostavimo sad da, umjesto sustava $Ax = b$ rješavamo

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

Ponovno pretpostavljamo da je operatorska norma perturbacije vektora $b$

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

Oduzimanjem $Ax = b$ od $A(x + \Delta x) = b + \Delta b$ izlazi

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

Množenjem slijeva s $A^{-1}$ dobivamo

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

# Perturbacija vektora $b$

Uzimanjem norme lijeve i desne strane, a zatim ocjenjivanjem odozgo, dobivamo

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

što pokazuje da je pogreška u rješenju, ponovno, proporcionalna uvjetovanosti matrice $A$.

Sada možemo generalizirati rezultat ako perturbiramo istovremeno i $A$ i $b$.

# *Perturbacija i $A$ i $b$*

Teorem. Neka je $Ax = b$ i

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

gdje je $\|\Delta A\| \le \varepsilon \,\|E\|$, $\|\Delta b\| \le \varepsilon \,\|f\|$, pri čemu je $E$ neka matrica, a $f$ neki vektor. Također, neka je $\varepsilon \,\|A^{-1}\|\,\|E\| < 1$. Tada za $x \ne 0$ vrijedi

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

# Perturbacija i $A$ i $b$

Komentar: Uobičajeno se za $E$ uzima $A$, jer je to pogreška koju napravimo spremanjem matrice $A$ u računalo. Jednako tako, za $f$ se 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 i $A$ i $b$

Dokaz. Provodi se na sličan način kao za pojedinačne perturbacije.
Ako oduzmemo $Ax = b$ od obje strane
$(A + \Delta A)\,(x + \Delta x) = b + \Delta b$, dobivamo

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

Množenjem s $A^{-1}$ slijeva, a zatim korištenjem svojstva operatorskih normi, lako izlazi traženo. $\blacksquare$

# Uloga reziduala

Kad smo računali računalom, umjesto pravog rješenja sustava $x$, dobili smo približno, $\hat{x}$.

Veličinu

$$r = b - A\hat{x},$$

zovemo rezidual rješenja.

Rezidual pravog rješenja $x$ je $r = 0$!

Međutim, ako je rezidual

- velik, onda sigurno nismo blizu pravom rješenju,
- ali rezidual može biti malen, a da izračunato rješenje sustava nije niti blizu pravom.

## *Uloga reziduala*

Primjer. Za sustav

$$H_{20}x = b$$

izračunat u `extended` točnosti, s desnom stranom takvom da je $x^T = [1, 1, \ldots, 1]$

- rezidual je nula-vektor,

a komponente rješenja su bile u stotinama.

# Uloga reziduala

Reziduali se obično koriste za poboljšavanje netočnog rješenja linearnog sustava.

To se obično provodi u tri koraka.

- Izračuna se rezidual $r = b - A\hat{x}$, pri čemu je $\hat{x}$ izračunato rješenje sustava.
- Riješi se sustav $Ad = r$, gdje je $d$ korekcija.
- Korekcija se doda izračunatom rješenju

$$y = \hat{x} + d,$$

što bi trebalo dati bolje rješenje.

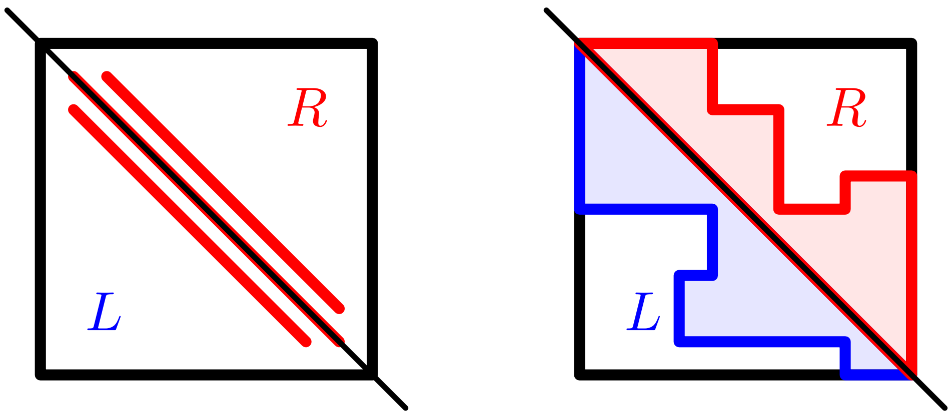
# Struktura LR faktorizacije

Ako matrica $A$ koja ulazi u LR faktorizaciju ima nekakvu strukturu, pitanje je kad će se ta struktura sačuvati.

To je posebno bitno za

- sustave gdje je $A$ takva da se bitna informacija o njoj može spremiti u bitno manje od $n^2$ elemenata.

Ako ne pivotiramo, onda se čuvaju, recimo, sljedeće forme:



# Kad ne moramo pivotirati?

Odgovor. Postoje tipovi matrica kad ne moramo pivotirati. Na primjer, to su:

- dijagonalno dominantne matrice po stupcima, tj. matrice za koje vrijedi

$$|a_{jj}| > \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^{n} |a_{ij}|,$$

- dijagonalno dominantne matrice po recima,
- simetrične pozitivno definitne matrice — o njima malo kasnije.

# Kad ne moramo pivotirati?

Za dijagonalno dominantne matrice po stupcima treba samo pokazati da iza prvog koraka eliminacije ostaju dijagonalno dominantne po stupcima.

1. Zaključak. $a_{11} \neq 0$ i maksimalan po apsolutnoj vrijednosti u 1. stupcu, pa sigurno možemo napraviti 1. korak eliminacije.

Dobivamo matricu $A^{(2)}$ oblika

$$A^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_1 \\ 0 & S \end{bmatrix},$$

pri čemu je $S$ regularna (dokaz korištenjem determinanti).

2. Korak. Moramo pokazati da je matrica $S$ dijagonalno dominantna po stupcima.

# Kad ne moramo pivotirati?

Za $j = 2, \ldots, n$ vrijedi

$$\sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}^{(2)}| = \sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} \left| a_{ij} - \frac{a_{i1}}{a_{11}} a_{1j} \right| \leq \sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}| + \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} \right| \sum_{\substack{i=2\\ i\neq j}}^{n} |a_{i1}|$$

(dijagonalna dominantnost obje sume)

$$< (|a_{jj}| - |a_{1j}|) + \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} \right| (|a_{11}| - |a_{j1}|)$$

$$= |a_{jj}| - \left| \frac{a_{1j}}{a_{11}} a_{j1} \right| \qquad \text{(koristimo } |a| - |b| \leq |a - b|\text{)}$$

$$\leq \left| a_{jj} - \frac{a_{1j}}{a_{11}} a_{j1} \right| = |a_{jj}^{(2)}|,$$

što pokazuje da je i $A^{(2)}$ dijagonalno dominantna po stupcima.

# *Simetrične pozitivno definitne matrice*

Za simetrične/hermitske pozitivno definitne matrice radi se "simetrizirana varijanta" LR faktorizacije

- jer je 2 puta brža nego obična LR faktorizacija,
- čuva strukturu matrice $A$ – čak i kad računamo u strojnoj aritmetici množenjem faktora uvijek dobivamo simetričnu matricu.

"Simetrizirana LR" faktorizacija zove se faktorizacija Choleskog.

Prisjećanje. Matrica je hermitska ako je

$$A = A^*.$$

Ako je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, onda je hermitska matrica isto što i simetrična, tj. $* = T$.

# Simetrične pozitivno definitne matrice

Pozitivna definitnost matrice se ne vidi odmah. Uobičajeno se unaprijed, iz prirode problema zna da je neka matrica pozitivno definitna.

Matrica $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ je pozitivno definitna ako je

$$x^* A x > 0 \quad \text{za svaki} \quad x \neq 0, \quad x \in \mathbb{F}^n.$$

Ekvivalentni uvjeti za pozitivnu definitnost:

- sve svojstvene vrijednosti od $A$ su pozitivne, tj. vrijedi

  $$\lambda_k(A) > 0, \quad \text{za} \quad k = 1, \ldots, n,$$

  gdje $\lambda_k$ označava $k$-tu najveću svojstvenu vrijednost;

## *Simetrične pozitivno definitne matrice*

Ekvivalentni uvjeti (nastavak):

- sve vodeće glavne minore od $A$ su pozitivne, tj. vrijedi

$$\det(A_k) > 0, \quad \text{za} \quad k = 1, \ldots, n,$$

  gdje je $A_k = A(1:k, 1:k)$ vodeća glavna podmatrica od $A$ reda $k$.

Digresija. Katkad se puno lakše vidi da neka matrica nije pozitivno definitna. Pokažite da nisu pozitivno definitne matrice koje

- na dijagonali imaju negativan element ili nulu.

# Faktorizacija Choleskog

Iz ekvivalentnog uvjeta odmah izlazi da za hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu uvijek može napraviti LR faktorizacija bez pivotiranja (v. Teorem)!

Tvrdnja. Za hermitsku/simetričnu pozitivno definitnu matricu $A$, LR faktorizaciju možemo napisati u obliku

$$A = LDL^*.$$

Ta faktorizacija se obično zove $LDL^*$ faktorizacija.

U LR faktorizaciji matrice $A$ faktor $R$ rastavi se na

$$R = DM^*$$

$D$ dijagonalna, $M^*$ gornjetrokutasta s jedinicama na dijagonali.

# Faktorizacija Choleskog

Da se dobije takva faktorizacija,

- dijagonalni elementi $R$ stave se na dijagonalu od $D$,
- svaki redak u $R$ podijeli se s dijagonalnim elementom u tom retku da se dobije $M^*$.

Dakle,

$$A = LDM^*, \quad M \ \text{donjetrokutasta, regularna.}$$

Zbog hermitičnosti/simetrije vrijedi

$$A = A^* = (LDM^*)^* = MDL^*,$$

pa je $LDM^* = MDL^* \ldots$

# Faktorizacija Choleskog

(nastavak) ...

$$LDM^* = MDL^*.$$

Množenjem slijeva s $L^{-1}$ i zdesna s $L^{-*}$ dobivamo

$$DM^*L^{-*} = L^{-1}MD.$$

Na lijevoj strani imamo produkt gornjetrokutastih matrica, a na desnoj strani donjetrokutastih, pa su ti produkti dijagonalne matrice.

Te dijagonalne matrice su jednake $D$ (jer i $M$ i $L$ imaju na dijagonali jedinice), pa je

$$L^{-1}MD = D \implies MD = LD \implies M = L.$$

# Faktorizacija Choleskog

Nadalje, $D$ ima pozitivne elemente, jer bi inače postojao vektor $x$ takav da je

$$(Ax, x) = (LDL^* x, x) = (DL^* x, L^* x) := (Dy, y) \le 0.$$

Dakle, $D$ možemo rastaviti na

$$D = \Delta \cdot \Delta$$

gdje je $\Delta$ dijagonalna i $\Delta_{ii} = \sqrt{D_{ii}}$.

Tada $LDL^*$ faktorizaciju možemo napisati u obliku:

$$A = LDL^* = (L\Delta)(\Delta L^*) = (L\Delta)(\Delta^* L^*) = (L\Delta)(L\Delta)^*.$$

## Faktorizacija Choleskog

Uz oznaku $R := (L\Delta)^*$ dobivamo faktorizaciju Choleskog

$$A = R^* R.$$

Digresija. Mnogi slovom $L$ označavaju $L := L\Delta$, pa se u literaturi faktorizacija Choleskog može naći napisana kao

$$A = LL^*.$$

Oprez: taj $L$ nema jedinice na dijagonali!

Kad znamo da postoji, Faktorizacija Choleskog se može i direktno izvesti, znajući da je $A = R^* R$.

# Algoritam

Ograničimo se na realni slučaj. Tada je

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i} r_{ki}\, r_{kj}, \quad i \le j,$$

pa dobivamo sljedeću rekurziju za elemente:

za $j = 1, \ldots, n$ :

$$r_{ij} = \left( a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}\, r_{kj} \right) \Big/ r_{ii}, \quad i = 1, \ldots, j-1,$$

$$r_{jj} = \left( a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} r_{kj}^2 \right)^{1/2}.$$

Za $j = 1$ računamo samo $r_{11}$.

Greške zaokruživanja $\Rightarrow$ moguć negativan izraz pod korijenom.

# Algoritam

Faktorizacija Choleskog

```
za j = 1 do n radi {
  /* Nađi j-ti stupac od R */
  /* Supstitucija unaprijed iznad dijagonale */
  za i = 1 do j - 1 radi {
    sum = A[i, j];
    za k = 1 do i - 1 radi {
      sum = sum - R[k, i] * R[k, j];
    };
    R[i, j] = sum / R[i, i];
  };
```

# Algoritam

```
  /* Dijagonalni element */
  sum = A[j, j];
  za k = 1 do j - 1 radi {
    sum = sum - R[k, j]**2;
  };
  ako je sum > 0.0 onda {
    R[j, j] = sqrt(sum)
  };
  inače
    /* Matrica nije pozitivno definitna, STOP */
};
```

# Komentar na algoritam

Uočimo da:

- se po prethodnoj rekurziji matrica $R$ generira stupac po stupac, dok se u LR faktorizaciji $R$ generirala redak po redak, a $L$ stupac po stupac;
- ovo je tzv. $jik$ varijanta algoritma, a naziv dolazi od poretka petlji uz prirodno imenovanje indeksa;
- ovo nije jedina varijanta za realizaciju algoritma.

Složenost algoritma (broj aritmetičkih operacija) je približno jednaka

$$OP(n) \sim \frac{1}{3}\, n^3,$$

što je približno polovina složenosti LR faktorizacije.

# Rješenje linearnog sustava

Kad imamo faktorizaciju Choleskog $A = R^T R$, onda se rješenje linearnog sustava $Ax = b$ svodi na dva rješavanja trokutastih sustava

$$R^T y = b, \quad Rx = y,$$

koje lako rješavamo:

- sustav $R^T y = b$ — supstitucijom unaprijed

$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 / r_{11} \\ y_i &= \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} r_{ji}\, y_j \right) \Big/ r_{ii}, \quad i = 2, \ldots, n, \end{aligned}$$

# Rješenje linearnog sustava

- sustav $Rx = y$ — supstitucijom unatrag

$$x_n = y_n / r_{nn}$$

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

Za razliku od LR faktorizacije, ovdje u obje supstitucije imamo dijeljenja.
Zbog toga se često koristi $LDL^T$ oblik faktorizacije:

- u algoritmu nema računanja drugih korijena;
- rješavaju se tri linearna sustava:

$$Lz = b, \quad Dy = z, \quad L^T x = y.$$

- $L$ ima jediničnu dijagonalu, pa štedimo $n$ dijeljenja.

# Može li $LDL^T$ za simetrične matrice?

Može li se $LDL^T$ faktorizacija napraviti za bilo koju simetričnu matricu $A$ (uz dozvolu da $D$ ima i negativne elemente)?

To ne vrijedi! Kontraprimjer:

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

Pomaže li simetrična permutacija redaka/stupaca? Ne!

Poopćenje na indefinitne matrice dobivamo tako da dozvolimo dijagonalne blokove reda $2$ u matrici $D$.

# Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

I kod faktorizacije Choleskog možemo koristiti pivotiranje.

- Da bismo očuvali simetriju radne matrice, pivotiranje mora biti "simetrično", tj. radimo istovremene zamjene redaka i stupaca u $A$
$$A \to P^T A P,$$
gdje je $P$ matrica permutacije.
- "Simetrična zamjena" $\Rightarrow$ dijagonalni element zamjenjuje mjesto s dijagonalnim!
- Standardni izbor pivotnog elementa u $k$-tom koraku je
$$a_{rr}^{(k)} = \max_{k \le i \le n} a_{ii}^{(k)},$$
što odgovara potpunom pivotiranju u Gaussovim eliminacijama.

# Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

Ovim postupkom dobivamo faktorizaciju Choleskog

$$P^T A P = R^T R,$$

a za elemente matrice $R$ vrijedi

$$r_{kk}^2 \geq \sum_{i=k}^{j} r_{ij}^2, \quad j = k+1, \ldots, n, \quad k = 1, \ldots, n.$$

Posebno, to znači da $R$ ima nerastuću dijagonalu

$$r_{11} \geq \cdots \geq r_{nn} > 0.$$