Numerička matematika
3. predavanje

Saša Singer

singer@math.hr

web.math.pmf.unizg.hr/~singer

PMF – Matematički odsjek, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Rješavanje linearnih sustava (nastavak):
  - Pivotiranje u Gaussovim eliminacijama (ponavljanje).
  - 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.
  - Obratna analiza grešaka i pivotiranje.
  - Pivotni rast kao mjera nestabilnosti.
  - Hilbertove matrice.
  - Uloga reziduala i iterativno poboljšanje rješenja.

Informacije

Konzultacije (službeno):

- samo za NM: utorak u 15 sati (iza predavanja),
- petak, 12–14 sati, ili — po dogovoru.

Ne zaboravite, "žive" su i domaće zadaće na adresi

`http://web.math.hr/nastava/unm/zadace.php`

ili, izravno

`http://degiorgi.math.hr/nm/`

Dodatni bodovi "čekaju na vas".

Informacije

Moja web stranica za Numeričku matematiku je

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

Tamo su kompletna predavanja iz prošlih godina, a stizat će i nova (kako nastaju). Kopija je na adresi

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

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

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

Skraćena verzija skripte — 2. dio (drugih 6 tjedana):

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

Pivotiranje u Gaussovim eliminacijama

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

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

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 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 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. malo 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

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

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

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.

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 $\det L = 1$, pa je regularnost matrice A ekvivalentna regularnosti matrice R, jer je

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

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, $i = 2$, $j = 2$, ...

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}.

LR faktorizacija — nalaženje (nastavak)

Napomena. 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.

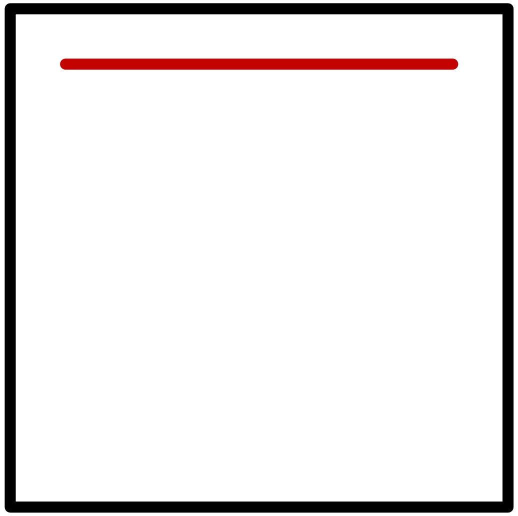
Primijetite, $r_{nn} \neq 0$ treba samo za povratnu supstituciju.

Pitanje: Kojim se redom računaju elementi 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).

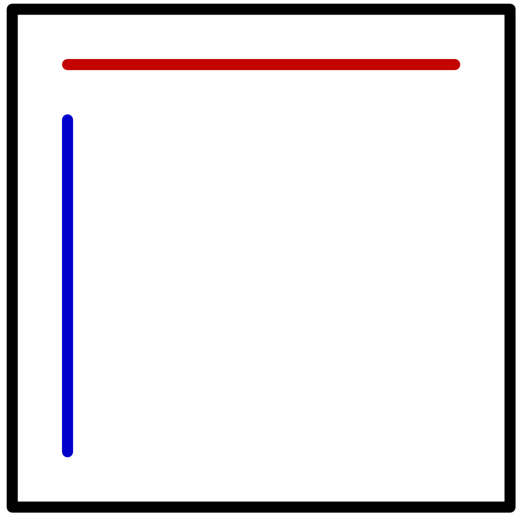
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



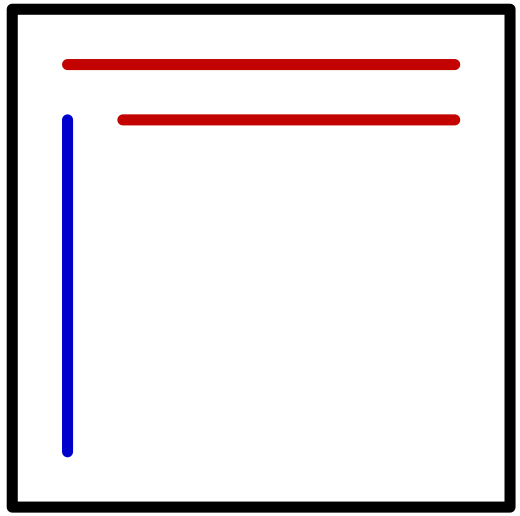
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



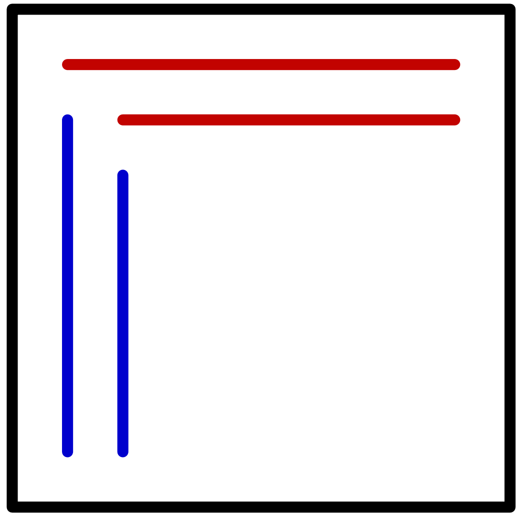
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



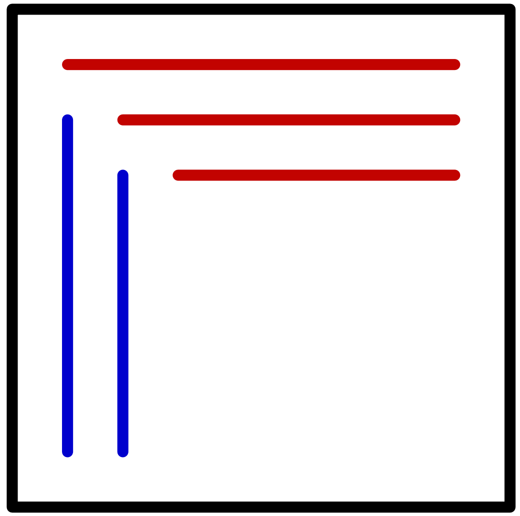
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



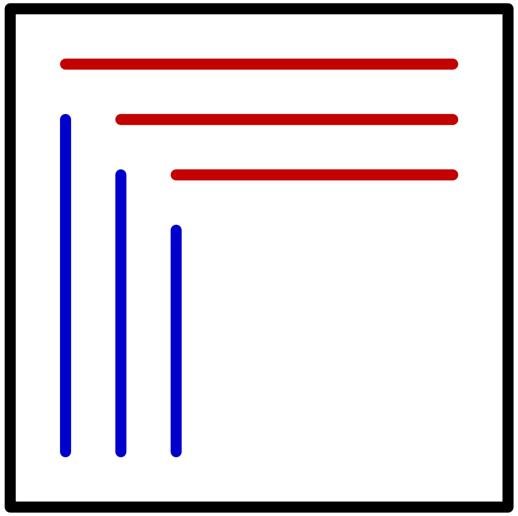
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



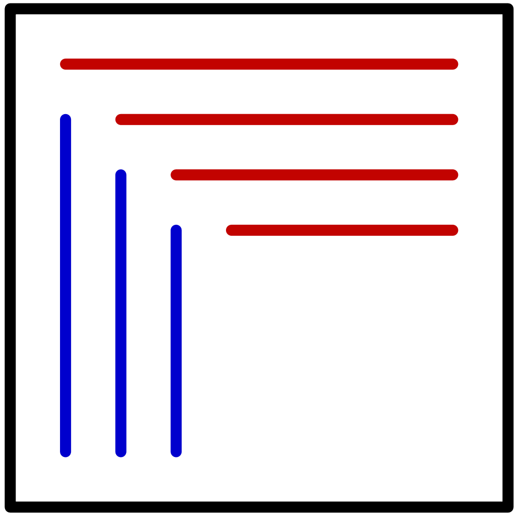
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



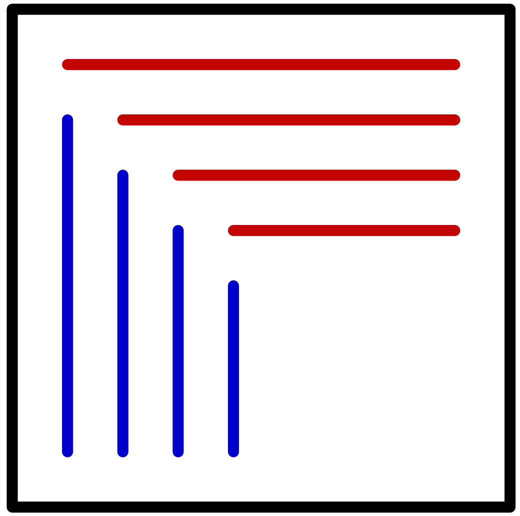
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



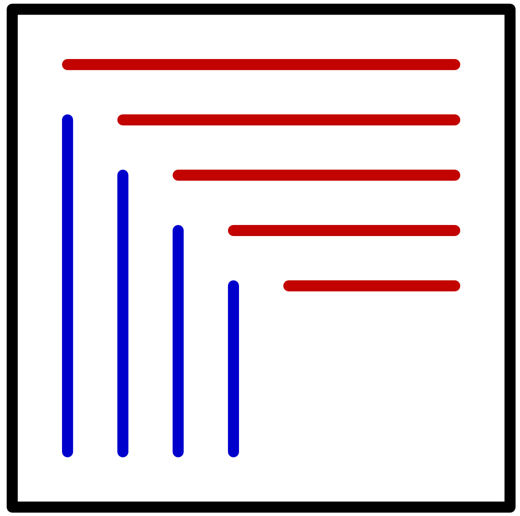
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



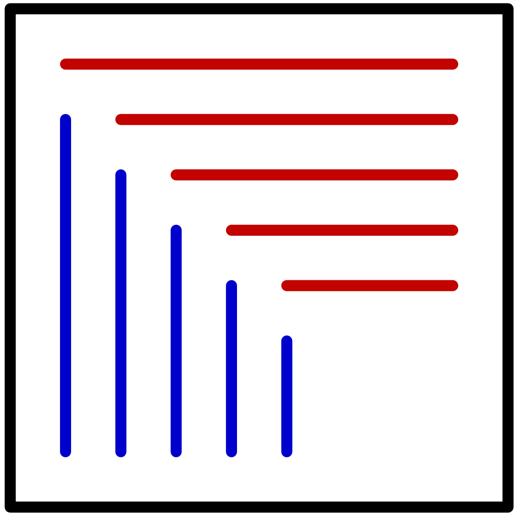
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



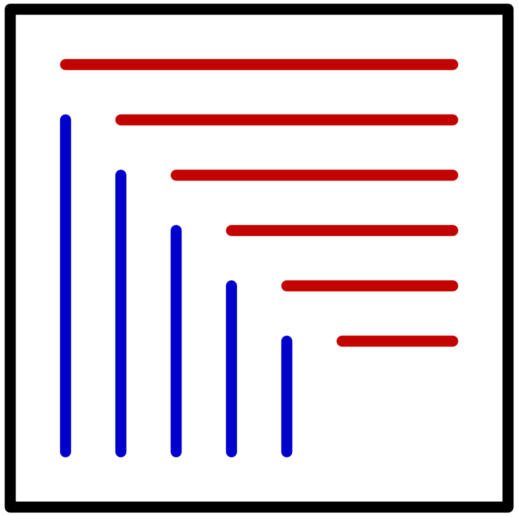
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



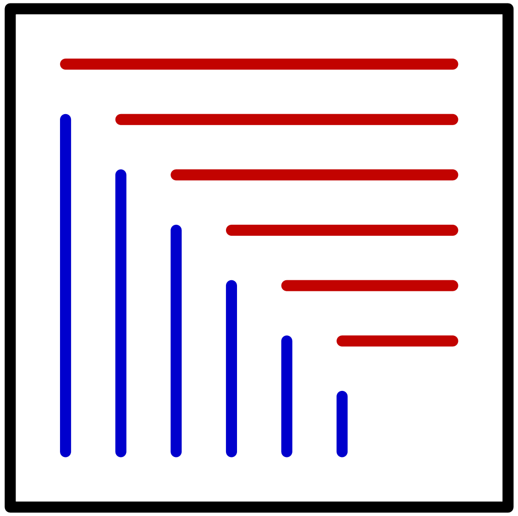
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



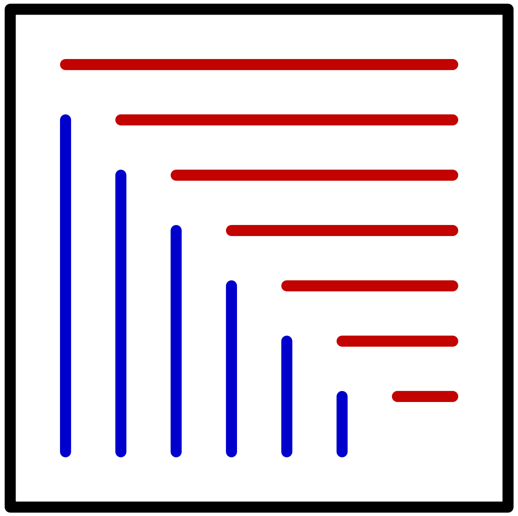
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



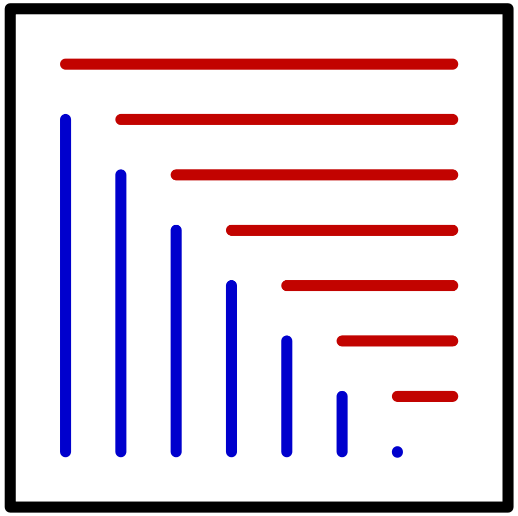
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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



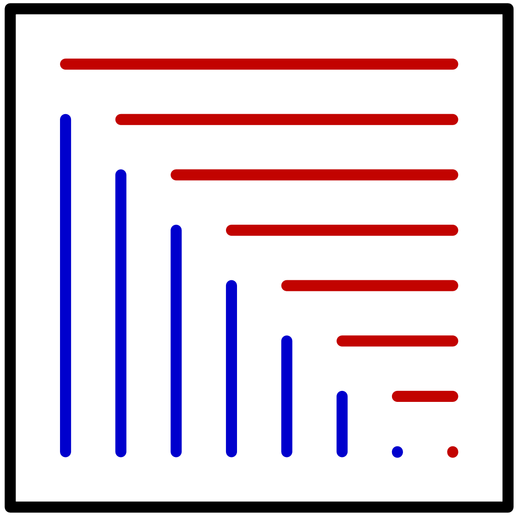
LR faktorizacija — poredak nalaženja

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).

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

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

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 nije jedinstvena.

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 $k = n - 1$

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

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

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

a m_{ik} su odgovarajući multiplikatori u k-tom koraku.

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 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.

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

- da 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

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

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

Oznaka norme = uvjetovanost dobije indeks norme. Na pr.

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

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

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

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 onom 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 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. 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).

Komentar rezultata teorije perturbacija

Uočimo da sve ocjene vrijede

- samo za "dovoljno male" perturbacije matrice A.

Na primjer, 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?

Primjer — loša uvjetovanost

Primjer. Na prvom predavanju imali smo primjer sustava

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

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

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

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

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

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 o perturbacijama

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 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

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

Rezultati obratne analize grešaka zaokruživanja

Obratna ocjena za LR faktorizaciju

Teorem. U aritmetici računala računamo LR faktorizaciju zadane matrice A, reda n. Pretpostavimo da je algoritam uspješno završio,

- bez pojave prevelikih ili premalih brojeva koji nisu prikazivi,
- i bez pokušaja dijeljenja s nulom.

Izračunati trokutasti faktori $\widehat{L}$ i $\widehat{R}$ onda zadovoljavaju

$$\widehat{L}\,\widehat{R} = A + \Delta A, \quad |\Delta A| \leq \gamma_n\,|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|,$$

gdje je γ_n standardna oznaka za mjeru grešaka zaokruživanja

$$\gamma_n := \frac{nu}{1 - nu}.$$

■

Obratna ocjena za rješenje sustava

Teorem. U aritmetici računala računamo rješenje linearnog sustava $Ax = b$, s matricom A, reda n.

Uz iste pretpostavke kao u prošlom teoremu, neka su

- $\widehat{L}$ i $\widehat{R}$ izračunati trokutasti faktori u LR faktorizaciji matrice A,
- i neka je $\widehat{x}$ izračunato rješenje sustava $Ax = b$.

Onda postoji perturbacija ΔA matrice A, za koju vrijedi

$$(A + \Delta A)\,\widehat{x} = b, \quad |\Delta A| \leq \gamma_{3n}\,|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|.$$

■

Za zaključak o relativnoj grešci, fali nam još

- neka veza između matrica $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|$ i $|A|$.

Put do relativnih ocjena

U idealnom slučaju, željeli bismo da je

$$|\Delta A| \leq u\,|A|.$$

To bi odgovaralo grešci zaokruživanja koju napravimo samo

- početnim spremanjem elemenata matrice A u memoriju računala.

No, to nije realistično. Nad svakim elementom matrice A

- vrši se još najviše n aritmetičkih operacija (za $A = LR$).

Zato ne možemo očekivati nešto bolje od ocjene oblika

$$|\Delta A| \leq c_n u\,|A|,$$

gdje je c_n "konstanta" reda veličine n, odnosno, $c_n u \approx c\,\gamma_n$.

Relativne ocjene — idealni slučaj

Na primjer, takvu ocjenu dobivamo pod uvjetom da $\widehat{L}$ i $\widehat{R}$ zadovoljavaju da je

$$|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| = |\widehat{L}\widehat{R}|.$$

To je idealan slučaj — i, naravno, ne vrijedi uvijek.

Ako to vrijedi, onda iz prvog teorema izlazi

$$|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| = |\widehat{L}\widehat{R}| = |A + \Delta A| \leq |A| + |\Delta A| \leq |A| + \gamma_n |\widehat{L}|\,|\widehat{R}|,$$

pa, prebacivanjem članova dobivamo

$$|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| \leq \frac{1}{1 - \gamma_n}\,|A|.$$

Relativne ocjene — idealni slučaj (nastavak)

Ako tu relaciju uvrstimo u drugi teorem, onda izlazi

$$(A + \Delta A)\,\widehat{x} = b, \quad |\Delta A| \leq \frac{\gamma_{3n}}{1 - \gamma_n}\,|A|,$$

tj. izračunato rješenje $\widehat{x}$ ima

- malu obratnu relativnu grešku po komponentama.

Za koje matrice vrijedi "idealno" $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}| = |\widehat{L}\widehat{R}|$?

Na primjer, ako LR faktorizacija daje nenegativne elemente u faktorima L i R, tj. vrijedi $L, R \geq 0$ (po elementima).

- Takve su tzv. totalno nenegativne ili totalno pozitivne matrice — i zato se kod njih ne pivotira u GE ili LR.

Javljaju se, na primjer, kod splajn interpolacije (v. kasnije).

Što je bitno za stabilnost?

Iz prethodna dva teorema slijedi da stabilnost LR faktorizacije i rješenja linearnog sustava

- ne ovisi o veličini multiplikatora,
- već o veličini elemenata koji se javljaju u matrici $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|$, relativno obzirom na odgovarajuće elemente matrice A (toliko kraćenje može nastati računanjem $\widehat{L}\widehat{R} \approx A$).

Naime, ta matrica $|\widehat{L}|\,|\widehat{R}|$

- može imati male elemente, iako su joj multiplikatori $m_{ij} = \ell_{ij}$ veliki — pripadni elementi u $\widehat{R}$ su jako mali,
- ali može imati i velike elemente, a da su joj multiplikatori reda veličine 1 — pripadni elementi u $\widehat{R}$ su veliki.

Analiza i procjena stabilnosti algoritma

Za lakšu analizu, ne gleda se po svim elementima, već se analizira omjer normi

$$\frac{\| \, |\widehat{L}| \, |\widehat{R}| \, \|}{\|A\|}.$$

Bitno: Ovaj omjer ovisi o algoritmu kojim računamo LR faktorizaciju matrice A!

Kod LR faktorizacije bez pivotiranja, ovaj omjer normi može biti proizvoljno velik. Na primjer, pokažite da je za matricu

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

taj omjer jednak ε^{-1}.

Stabilnost parcijalnog pivotiranja

Kod parcijalnog pivotiranja ($PA = LR$) znamo da vrijedi

$$|\ell_{ij}| \leq 1 \quad \text{za sve} \quad i \geq j.$$

Kad uvrstimo $m_{ik} = \ell_{ik}$ u formule transformacije elemenata

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

indukcijom po koracima eliminacije, dobivamo da vrijedi

$$|r_{ij}| \leq 2^{i-1} \max_{k \leq i} |(PA)_{kj}| \leq 2^{i-1} \max_{k} |a_{kj}|,$$

jer element r_{ij} nastaje nakon $i - 1$ koraka eliminacije.

Dakle, kod parcijalnog pivotiranja

- L je malen, a R je ograđen relativno obzirom na A.

Pivotni rast

Parcijalno vs. potpuno pivotiranje

Možemo li, i na temelju čega, reći da je potpuno pivotiranje "bolje" od parcijalnog?

- Tradicionalno, to se čini na temelju tzv. pivotnog rasta.

Pivotni rast ili "faktor rasta", u oznaci ρ_n, je omjer

- najvećeg (po apsolutnoj vrijednosti) elementa u svim koracima eliminacije — ovisi o pivotiranju,
- i (apsolutno) najvećeg elementa u originalnoj matrici A,

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

Intuitivno je jasno da nije dobro da elementi jako narastu po apsolutnoj vrijednosti, jer to može dovesti do gubitka točnosti. To je analogno "uništavanju" polaznih jednadžbi!

Pivotni rast — parcijalno pivotiranje

Koliki je pivotni rast ρ_n^p kod parcijalnog pivotiranja?

Transformacije elemenata u k-tom koraku eliminacija su

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}.$$

Kod parcijalnog pivotiranja, za multiplikatore m_{ik} vrijedi

$$|m_{ik}| \leq 1,$$

pa je

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

Nakon $n-1$ koraka algoritma, ova ocjena daje pivotni rast ρ_n^p

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

Pivotni rast — parcijalno pivotiranje (nastavak)

Već je J. H. 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 — potpuno pivotiranje

J. H. Wilkinson je 1961. godine dokazao da za pivotni rast ρ_n^c kod potpunog pivotiranja vrijedi ocjena odozgo

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

i da se ta ocjena ne može dostići.

Dugo se mislilo da vrijedi

$$\rho_n^c \leq n.$$

Međutim, nađeni su kontraprimjeri matrica kad to ne vrijedi.

- 1991. g. — matrica reda 13 za koju je $\rho_{13}^c = 13.0205$,
- 1992. g. — matrica reda 25 za koju je $\rho_{25}^c = 32.986341$.

Točno ponašanje ρ_n^c je otvoren problem!

Ocjena stabilnosti preko faktora rasta

Tradicionalno, obratna analiza greške izražava se preko pivotnog rasta ili faktora rasta (engl. growth factor)

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

U procesu Gaussovih eliminacija, očito vrijedi da je

$$|r_{ij}| = \left|a_{ij}^{(i)}\right| \leq \rho_n \max_{i,j} |a_{ij}|.$$

što daje ogradu za R, relativno obzirom na A. Naravno, faktor rasta ρ_n ovisi o algoritmu kojim računamo.

Može se naći i precizna ocjena omjera normi odozgo, preko faktora rasta, i obratno (ovisi o algoritmu i izabranoj normi).

Obratna ocjena za sustav preko faktora rasta

Teorem (Wilkinson). Neka je A regularna kvadratna matrica reda n i neka je $\widehat{x}$ izračunato rješenje sustava $Ax = b$

- Gaussovim eliminacijama s parcijalnim pivotiranjem u aritmetici računala.

Tada vrijedi

$$(A + \Delta A)\,\widehat{x} = b, \quad \|\Delta A\|_\infty \leq n^2 \gamma_{3n} \rho_n \|A\|_\infty.$$

U prethodnom teoremu, pretpostavka da koristimo parcijalno pivotiranje nije nužna.

Naime, slično vrijedi i za Gaussove eliminacije bez pivotiranja, samo s malo drugačijim oblikom faktora ispred $\|A\|_\infty$.

Naravno, faktor rasta ρ_n može biti puno veći!

Hilbertove matrice

Hilbertova matrica

Primjer. Kod aproksimacije polinomima javljaju se linearni sustavi oblika

$$H_n x = b,$$

gdje je H_n Hilbertova matrica reda n, $(H_n)_{ij} = \frac{1}{i+j-1}$, ili

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

Hilbertova matrica

Da bismo ispitali točnost rješenja, stavimo desnu stranu

$$b(i) := \sum_{j=1}^{n} H_n(i,j) = \sum_{j=1}^{n} \frac{1}{i+j-1}, \qquad i = 1, \ldots, n,$$

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

Što možemo očekivati od rješenja takvog sustava?

Pogled na Frobeniusovu normu matrice H_n kaže da ona nije naročito velika,

$$\|H_n\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \left|\frac{1}{i+j-1}\right|^2} \leq \sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} 1} = n.$$

Hilbertova matrica — uvjetovanost

Međutim … ne treba gledati samo normu matrice!!!

Uvjetovanost Hilbertovih matrica je vrlo visoka:

n	$\kappa_2(H_n)$
2	$1.928 \cdot 10^{1}$
3	$5.241 \cdot 10^{2}$
4	$1.551 \cdot 10^{4}$
5	$4.766 \cdot 10^{5}$
6	$1.495 \cdot 10^{7}$
7	$4.754 \cdot 10^{8}$
8	$1.526 \cdot 10^{10}$

n	$\kappa_2(H_n)$
9	$4.932 \cdot 10^{11}$
10	$1.603 \cdot 10^{13}$
11	$5.231 \cdot 10^{14}$
12	$1.713 \cdot 10^{16}$
13	$5.628 \cdot 10^{17}$
14	$1.853 \cdot 10^{19}$

n	$\kappa_2(H_n)$
15	$6.117 \cdot 10^{20}$
16	$2.022 \cdot 10^{22}$
17	$6.697 \cdot 10^{23}$
18	$2.221 \cdot 10^{25}$
19	$7.376 \cdot 10^{26}$
20	$2.452 \cdot 10^{28}$

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 2, 5$

Za sustav $H_n x = b$ s Hilbertovom matricom, za razne n,

- GE s parcijalnim pivotiranjem, u `extended` točnosti,

umjesto svih jedinica u rješenju, dobivamo ove rezultate:

Red $n = 2$

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

Red $n = 5$

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

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

$$x(3) = 1.0000000000000007$$

Uvjetovanost: $\approx 4.766 \cdot 10^5$.

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 10$

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

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

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 15$

$$x(1) = 1.0000000005406387 \qquad x(9) = 1.0952919444304200$$
$$x(2) = 0.9999999069805858 \qquad x(10) = 0.8797820363884070$$
$$x(3) = 1.0000039790948573 \qquad x(11) = 1.0994671444236333$$
$$x(4) = 0.9999257525660447 \qquad x(12) = 0.9508102511158300$$
$$x(5) = 1.0007543452271621 \qquad x(13) = 1.0106027108940050$$
$$x(6) = 0.9953234190795597 \qquad x(14) = 1.0012346841153261$$
$$x(7) = 1.0188643674562383 \qquad x(15) = 0.9992252029377023$$
$$x(8) = 0.9487142544341838$$

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

Hilbertova matrica — rješenje za $n = 20$

$$\begin{aligned}
x(1) &= 1.0000000486333029 & x(11) &= 231.3608002738048500 \\
x(2) &= 0.9999865995557111 & x(12) &= -60.5143391625873562 \\
x(3) &= 1.0008720556363132 & x(13) &= -57.6674972682886125 \\
x(4) &= 0.9760210562677670 & x(14) &= 5.1760567992057506 \\
x(5) &= 1.3512820600312678 & x(15) &= 8.7242780841976215 \\
x(6) &= -2.0883247796748707 & x(16) &= 210.1722288687690970 \\
x(7) &= 18.4001541798146106 & x(17) &= -413.9544667202651170 \\
x(8) &= -63.8982130462650081 & x(18) &= 349.7671855031355400 \\
x(9) &= 161.8392478869777220 & x(19) &= -142.9134532513063250 \\
x(10) &= -254.7902985140752950 & x(20) &= 25.0584794423327874
\end{aligned}$$

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

Uvjetovanost Hilbertovih matrica

Može se pokazati da za uvjetovanost Hilbertove matrice H_n vrijedi formula

$$\kappa_2(H_n) \approx \frac{\left(\sqrt{2}+1\right)^{4n+4}}{2^{15/4}\sqrt{\pi n}} \quad \text{za} \quad n \to \infty.$$

Dakle, iako Hilbertove matrice imaju "idealna" svojstva,

- simetrične, pozitivno definitne (čak totalno pozitivne = determinanta svake kvadratne podmatrice je pozitivna),

njihova uvjetovanost katastrofalno brzo raste!

"Krivci" za to su elementi inverza H_n^{-1}.

Inverz Hilbertove matrice

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}?

Inverz Hilbertove matrice

Elementi inverza H_n^{-1} Hilbertove matrice mogu se eksplicitno izračunati u terminima binomnih koeficijenata

$$(H_n^{-1})_{ij} = (-1)^{i+j}\,(i+j-1)\cdot$$
$$\cdot \binom{n+i-1}{n-j}\binom{n+j-1}{n-i}\binom{i+j-2}{i-1}^2.$$

Lako se vidi da ovi elementi vrlo brzo rastu za malo veće n.

Pogledajte

http://mathworld.wolfram.com/HilbertMatrix.html

Rezidual i iterativno poboljšanje rješenja

Rezidual približnog rješenja

Kad rješenje sustava $Ax = b$ računamo približno (računalom),

- umjesto pravog rješenja x, dobivamo približno rješenje $\hat{x}$.

Veličinu

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

zovemo rezidual izračunatog rješenja $\hat{x}$.

Napomena. Egzaktni rezidual pravog rješenja x je $r = 0$!

Međutim, ako je (egzaktni) rezidual

- velik, onda sigurno nismo blizu pravom rješenju,
- ali rezidual može biti malen, a da izračunato rješenje $\hat{x}$ sustava nije ni blizu pravom rješenju x.

Izračunati rezidual

Primjer. Gledamo izračunato rješenje $\hat{x}$ linearnog sustava

$$H_{20}x = b$$

s desnom stranom takvom da je $x^T = [1, 1, \ldots, 1]$.

Kad računamo u `extended` točnosti,

- izračunati rezidual $\hat{r} = b - A\hat{x}$ je nula-vektor (kraćenje),

a komponente rješenja $\hat{x}$ su bile u stotinama.

Ovo ponašanje je u skladu s teorijom perturbacija, koja

- garantira mali rezidual r, za iole razumne perturbacije,
- a izračunato rješenje $\hat{x}$ može biti katastrofalno, ako je uvjetovanost matrice A velika.

Uloga reziduala — poboljšanje točnosti

Reziduali se mogu iskoristiti za poboljšavanje netočnog rješenja linearnog sustava.

To se obično provodi u tri koraka — može i iterativno.

- Izračuna se rezidual $r = b - A\hat{x}$, pri čemu je $\hat{x}$ izračunato (ili približno) 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 y. Za egzaktne r i d bi bilo $r(y) = b - Ay = b - A\hat{x} - Ad = r - r = 0$.

Postupak se može ponoviti s y, umjesto $\hat{x}$.

Računanje reziduala — mora u većoj točnosti

Ovo ima smisla samo ako se prvi korak

- računanje reziduala $r = b - A\hat{x}$
- radi u većoj točnosti od one u kojoj je izračunat $\hat{x}$.

To je nužno zbog kraćenja, tako da

- izračunati $\hat{r}$ ima dovoljnu relativnu točnost.

Preostala dva koraka standardno se rade

- u "običnoj" točnosti, istoj kao za $\hat{x}$.

Baš to je ideja — samo n^2 operacija je u većoj točnosti.

Tipično se računanje reziduala radi u dvostrukoj točnosti:

- jedinična greška zaokruživanja je reda veličine u^2, obzirom na jednostruku. Na pr. `double`, prema `single`.