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

Bitno: nadoknada uskršnjeg petka 10. 4. je sutra

- subota, 28. 3., od 11–14 u (003).

Nadoknada "predkolokvijskog" petka 17. 4. je sljedeći tjedan

- subota, 4. 4., od 11–14 u (003).

Kolegij "Numerička matematika" ima demonstratora!

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

Pogledajte oglas na oglasnoj ploči za dogovor.

Informacije — nastavak

Bitno: "Oživile" su i domaće zadaće iz NM.

- Realizacija ide "automatski" — preko web aplikacije, slično kao na Prog1.

Pogledajte na službeni web kolegija, pod "zadaće".

- Tamo su početne upute.

Skraćeni link je

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

Direktni link na aplikaciju za zadaće je

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

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

Skraćena je — za okruglo 30 stranica!

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

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

Informacije — nastavak

Na molbu Sanje Singer i Vedrana Novakovića, za goste je otvorena i web stranica kolegija Matematika 3 i 4 na FSB-u.

Tamo možete naći dodatne materijale za neke dijelove NM,

- posebno — vježbe i riješene zadatke.

Predavanja su "malo nježnija" od naših. Početna stranica je

`http://e-ucenje.fsb.hr/`

Zatim potražite "Katedra za matematiku" i onda:

- odete (kliknete) na kolegije Matematika 3 i 4,
- kliknete na gumb "Prijava kao gost",
- na stranici potražite blok 3 "Numerička matematika".

Iskoristite! Naravno, smijete pogledati i ostalo!

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

Može se pokazati da je

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

Neka je

- $A^{(k)}$ 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 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 u k-tom koraku.

Na kraju eliminacija, nakon $n-1$ koraka, dobijemo gornju trokutastu matricu $\widetilde{R}$,

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

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 $\widetilde{R} = R$.

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 — pokažite to!

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

$$PAx = LRx = Pb.$$

Oprez: kad permutiramo, istovremeno zamjenjujemo retke

- u obje "radne matrice" — $(L - I)$ 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. $p[i] = j \iff P_{ij} = 1$.

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:

$$
\begin{aligned}
P:&\quad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \\
p:&\quad \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 3 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}.
\end{aligned}
$$

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

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

Dakle, jedina razlika obzirom na parcijalno pivotiranje je

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

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

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

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 ρ_n^p

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

Pivotni rast

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

Za potpuno pivotiranje pivotni rast ρ_n^c može se ograditi odozgo s

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

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. godine), matrice reda 13 ima pivotni rast $\rho_n^c = 13.0205$.

Teorija perturbacije linearnih sustava

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 x ovog problema, 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 $n^2 + n$,
- 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

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

Gledamo najgoru moguću uvjetovanost, po svim vektorima b,

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

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

$$\operatorname{cond} A \approx 2.61838527365482686 89.$$

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 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 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	$\kappa_2(H_n)$
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 — $n = 2, 5$

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 — $n = 15$

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

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

Hilbertova matrica — $n = 20$

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

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),

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`

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 ε 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 Δx 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 matrice A i vektora b

Teorem. Neka je $Ax = b$ i

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

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

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 matrice A i vektora b

Dokaz (skica). Provodi se na sličan način kao za pojedinačne perturbacije.

Ako od $(A + \Delta A)\,(x + \Delta x) = b + \Delta b$ oduzmemo $Ax = b$, 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.

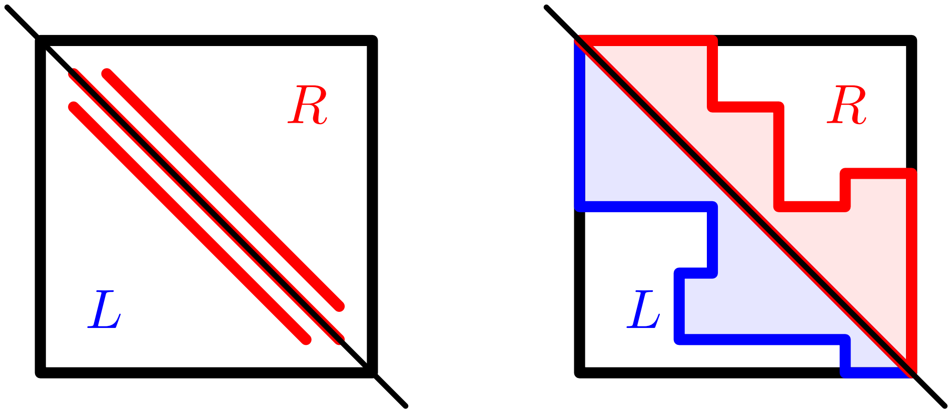
Struktura LR faktorizacije

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)

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

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

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

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 λ_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.

Pozitivna definitnost i simetrija

Za kompleksne matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, može se pokazati da vrijedi

- A je pozitivno definitna $\implies$ A je hermitska $(A = A^*)$.

Za realne matrice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ to ne mora vrijediti, tj.

- pozitivno definitna matrica ne mora biti simetrična (može biti i $A \neq A^T$).

Međutim, u numerici se vrlo često koristi "stroža" varijanta pojma — koja, po definiciji, uključuje i simetriju:

- Realna matrica $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ pozitivno definitna ako je simetrična i za svaki $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, vrijedi $x^T A x > 0$.

Da ne bude zabune, u nastavku, koristimo "strožu" definiciju! U tom slučaju, originalni pojam (bez simetrije) katkad se zove samo "pozitivnost" matrice A.

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

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

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

Dakle, D možemo rastaviti na

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

gdje je Δ 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

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

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

$$y_1 = b_1 / r_{11}$$

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

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
$$a_{rr}^{(k)} = \max_{k \leq i \leq n} a_{ii}^{(k)},$$
što odgovara potpunom pivotiranju u Gaussovim eliminacijama.

Pivotiranje u faktorizaciji Choleskog

Ovim postupkom dobivamo faktorizaciju Choleskog

$$P^T AP = R^T R,$$

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

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