Numerička analiza

5. predavanje – dodatak

Autor: Saša Singer

Predavač: Nela Bosner

nela@math.hr

web.math.hr/~nela/nad.html

PMF – Matematički odjel, Zagreb

Sadržaj predavanja

- Gaussove eliminacije:
  - Algoritam.
  - Gaussove eliminacije s parcijalnim i potpunim pivotiranjem.
  - Pivotni rast i ocjena pivotiranja.
  - LR faktorizacija.
  - Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije.

Kako naći rješenje? — Gaussove eliminacije!

Najjednostavnija metoda za rješavanje linearnih sustava su

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

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

$$Rx = y,$$

gdje je

- R trokutasta matrica (recimo, gornja),

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

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

Ekvivalentne transformacije sustava

Ekvivalentne transformacije sustava su

- one koje ne mijenjaju rješenje sustava.

Standardne ekvivalentne transformacije su (v. LA):

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

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

Gaussove eliminacije — komentari

Par komentara, prije detaljnog opisa metode.

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

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

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

Gaussove eliminacije — komentari (nastavak)

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — algoritam

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

1. korak.

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

Kako se to radi?

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

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

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

Pritom se prva jednadžba se ne mijenja.

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

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

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

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

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

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

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

Relacije za nove elemente su

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

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

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

Iz ovih relacija za nove elemente (prepisane još jednom)

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

vidimo da su multiplikatori

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

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

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

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — algoritam (nastavak)

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

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

Pitanje: Ako je A kvadratna i regularna,

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

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

Gaussove eliminacije — primjedba na algoritam

Odgovor: Ne!

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

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

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

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

Zaključak: Moramo dozvoliti promjenu poretka jednadžbi.

Gaussove eliminacije s pivotiranjem

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

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

Odgovor: Ako dozvolimo pivotiranje

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

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

Gaussove eliminacije — kako pivotiramo?

Pitanje: Kako vršiti pivotiranje, tj. zamjene jednadžbi?

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

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

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

Jedna jedina operacija može upropastiti rezultat!

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

Gaussove eliminacije — primjer

Primjer. Zadan je linearni sustav

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

Matrica sustava je regularna, pa postoji jedinstveno rješenje

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — primjer (nastavak)

Sustav zapisan u takvom "računalu" pamti se kao

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

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — primjer (nastavak)

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

Dakle, nova druga jednadžba glasi

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

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

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

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

Gaussove eliminacije — primjer (nastavak)

Razlog za ogromnu relativnu grešku (100%):

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

Drugim riječima, utjecaj polazne druge jednadžbe

- postaje zanemariv u novoj drugoj jednadžbi.

U polaznoj drugoj je moglo pisati "bilo što"!

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Promijenimo li poredak jednadžbi, dobivamo

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

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

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

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

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

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

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

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

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

Razlog za vrlo malu relativnu grešku:

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

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Kao i ranije, u koraku eliminacije,

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

Međutim, nakon zamjene

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

Zaključak: Sigurno nije dovoljno uzeti

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

kao ključni element za eliminacije,

- jer možemo dobiti potpuno pogrešan rezultat.

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

Primjer. Usporedimo izračunata rješenja sustava

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

za $\varepsilon = 10^{-1}, \ldots, 10^{-25}$, Gaussovim eliminacijama bez zamjena i sa zamjenom poretka jednadžbi, u aritmetici računala.

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

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

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

Gaussove eliminacije s pivotiranjem — primjer

p	x_1 bez pivotiranja	x_1 s pivotiranjem	x_2
-4	1.000100010001000**00**	1.000100010001000**10**	0.999899989998999990
-5	1.0000100000100002**00**	1.0000100000100001**00**	0.999989999899999900
-6	1.00000100000099609	1.00000100000100000	0.99999899999900000
-7	1.00000009999978538	1.00000010000001000	0.99999989999999000
	$\vdots$	$\vdots$	
-17	0.99746599868666408	1.00000000000000001	0.99999999999999999
-18	0.97578195523695399	1.00000000000000000	1.00000000000000000
-19	1.08420217248550443	1.00000000000000000	1.00000000000000000
-20	0.00000000000000000	1.00000000000000000	1.00000000000000000

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

Pivotni element uobičajeno se bira korištenjem parcijalnog pivotiranja

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

tj. ako je u k-tom koraku

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

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

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

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

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

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

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

Ako je multiplikator m_{ik} velik, u aritmetici pomičnog zareza može doći do kraćenja najmanje značajnih znamenki $a_{ij}^{(k)}$, tako da izračunati $a_{ij}^{(k+1)}$ može imati veliku relativnu grešku.

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

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

Za multiplikatore kod parcijalnog pivotiranja vrijedi

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

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

Gaussove eliminacije s potpunim pivotiranjem

Osim parcijalnog pivotiranja, može se provoditi i potpuno pivotiranje. U k-tom koraku, bira se maksimalni element u cijelom “ostatku” matrice $A^{(k)}$, a ne samo u k-tom stupcu.

Ako je u k-tom koraku

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

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

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

Ovo nisu jedine mogućnosti pivotiranja kod rješavanja linearnih sustava.

Algoritam

Gaussove eliminacije s parcijalnim pivotiranjem

```
/* Trokutasta redukcija */

za k = 1 do n - 1 radi {
  /* Nađi maksimalni |element| u ostatku stupca */
  max_elt = 0.0;
  ind_max = k;
  za i = k do n radi {
    ako je |A[i, k]| > max_elt onda {
      max_elt = |A[i, k]|;
      ind_max = i;
    }
  };
```

Algoritam (nastavak)

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

Algoritam (nastavak)

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

Algoritam (nastavak)

```
/* Povratna supstitucija */

/* Rješenje x izračunaj u b */
b[n] = b[n] / A[n, n];
za i = n - 1 do 1 radi {
  sum = b[i];
  za j = i + 1 do n radi {
    sum = sum - A[i, j] * b[j];
  };
  b[i] = sum / A[i, i];
};
```

Složenost algoritma

Prebrojimo sve aritmetičke operacije ovog algoritma:

U prvom koraku trokutaste redukcije obavlja se:

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

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

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

Složenost algoritma (nastavak)

Ukupno, u k-tom koraku imamo

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

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

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

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

Složenost algoritma (nastavak)

Potpuno istim zaključivanjem dobivamo da u povratnoj supstituciji ima:

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

što je zajedno točno n^2 operacija.

Dakle, ukupan broj operacija u Gaussovim eliminacijama je

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

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

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 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

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

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

Dugo se mislilo da vrijedi

$$\rho_n^c \le n.$$

Međutim, nađeni su primjeri matrica kad to ne vrijedi.

Kontraprimjer (konstruiran 1991. godine), matrice reda 13 ima pivotni rast $\rho_n^c = 13.0205$.

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.

LR faktorizacija

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

$$A = LR,$$

pri čemu je

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

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

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

LR faktorizacija (nastavak)

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

$$LRx = b.$$

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

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

Prednost LR faktorizacije:

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

LR faktorizacija (nastavak)

Oba sustava se lako rješavaju:

- prvi $Ly = b$ — supstitucijom unaprijed

$$y_1 = b_1,$$

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

- drugi $Rx = y$ — povratnom supstitucijom

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

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

LR faktorizacija (nastavak)

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

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

Dobivamo:

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

LR faktorizacija (nastavak)

Tako dobivamo rekurziju za elemente matrica L i R

$$
\begin{aligned}
r_{1j} &= a_{1j}, \quad j = 1, \ldots, n, \\
\ell_{j1} &= \frac{a_{j1}}{r_{11}}, \quad j = 2, \ldots, n,
\end{aligned}
$$

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

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

U zadnjem koraku, za $i = n$, računamo samo r_{nn}.

LR faktorizacija (nastavak)

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

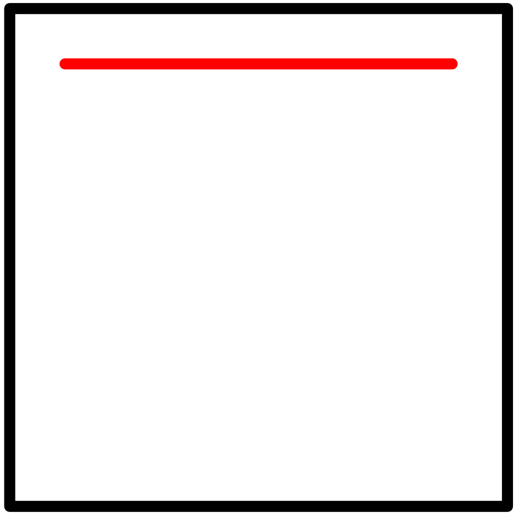
- možemo izračunati sve netrivijalne elemente matrica L i R,
- drugim riječima imamo egzistenciju i jedinstvenost matrica L i R.

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

Pitanje: Kojim se redom računaju elementi?

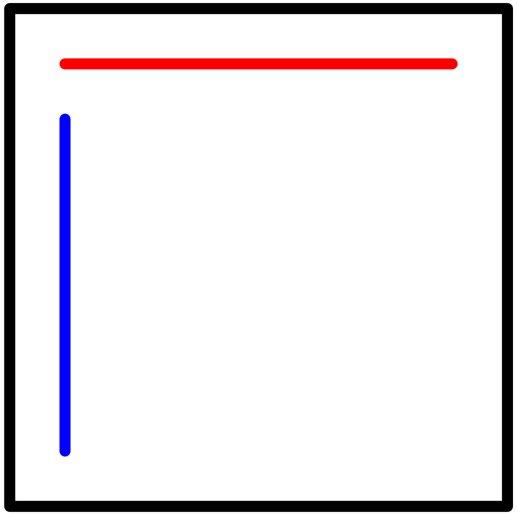
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



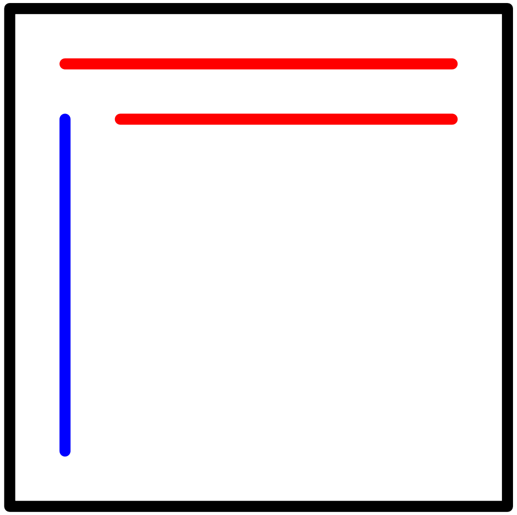
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



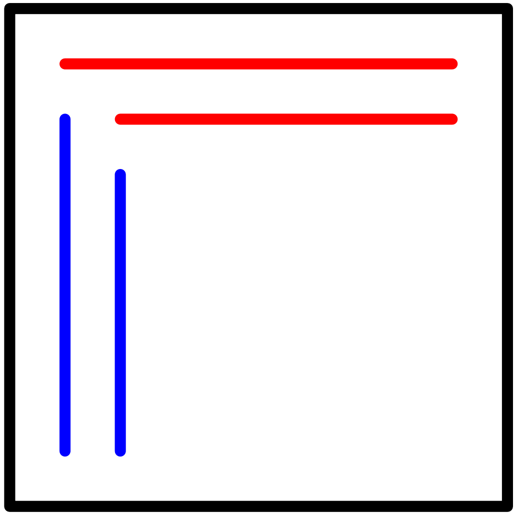
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



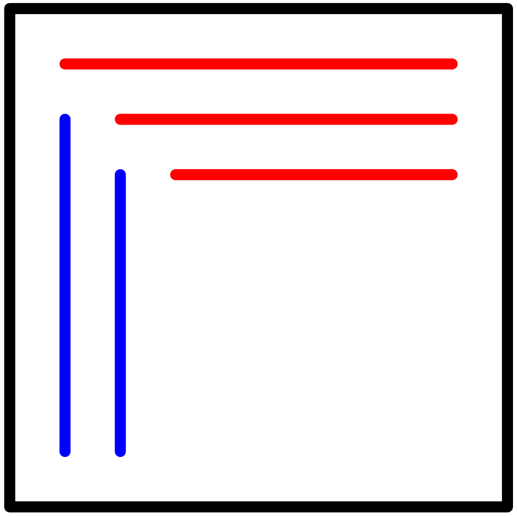
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



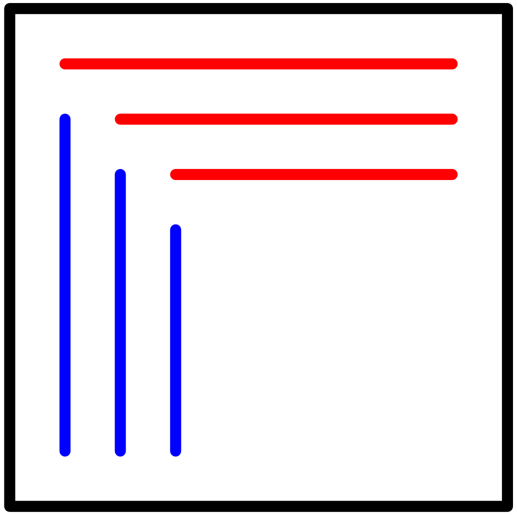
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



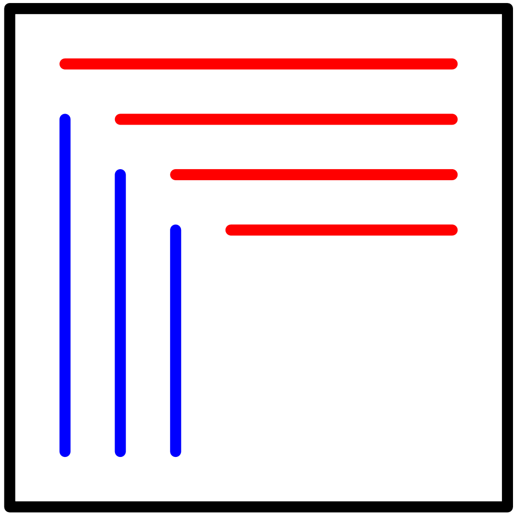
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



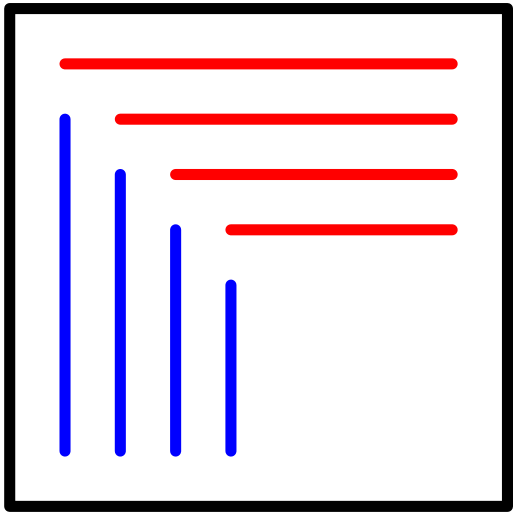
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



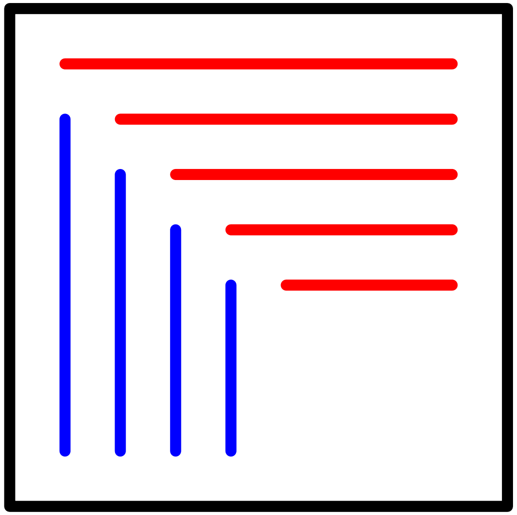
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



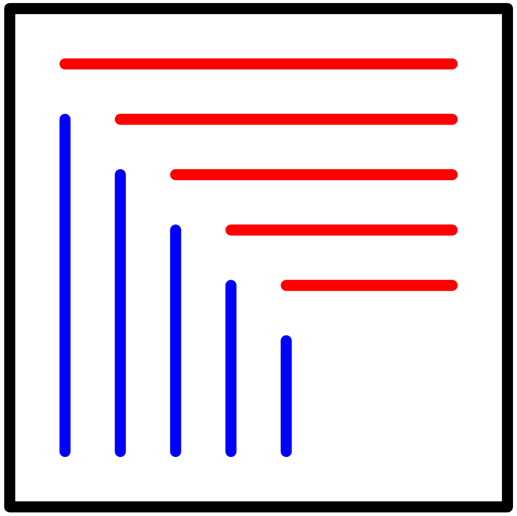
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



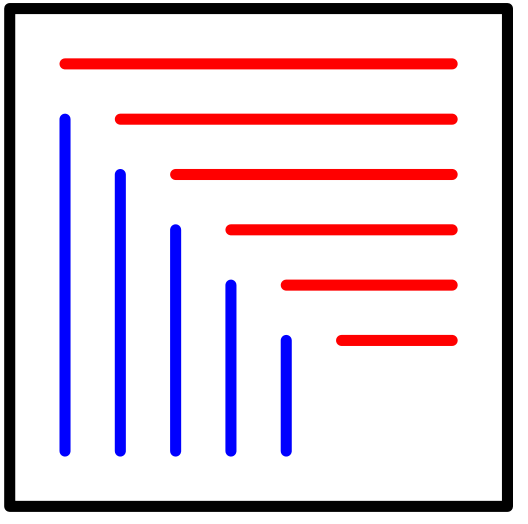
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



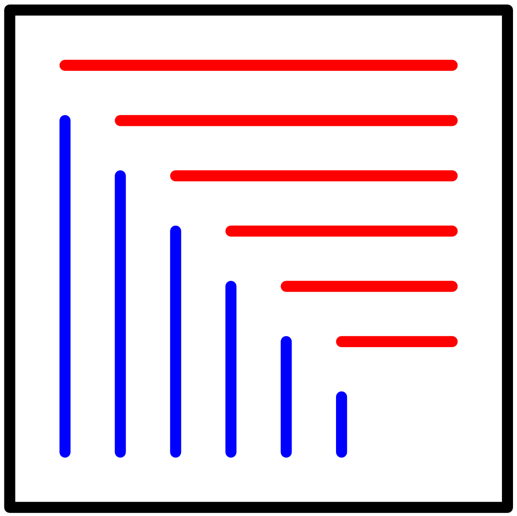
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



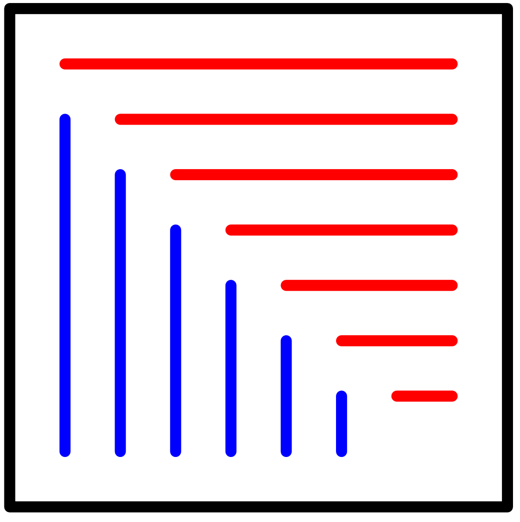
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



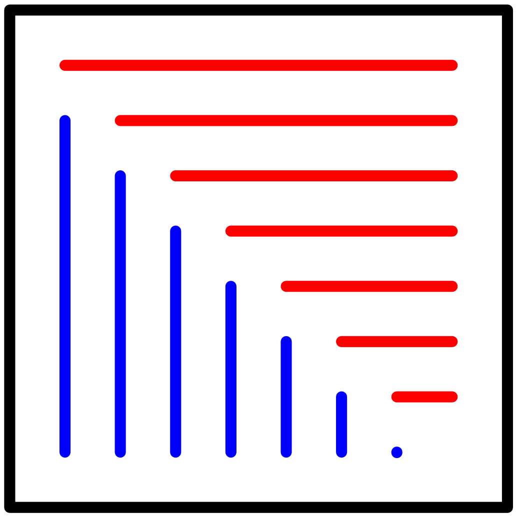
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



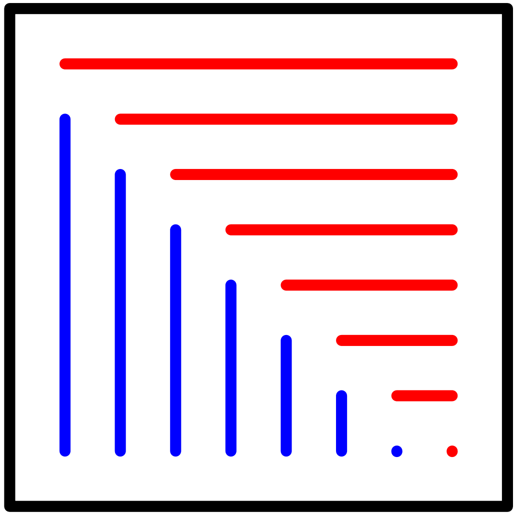
LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



LR faktorizacija (nastavak)

Poredak računanja elemenata plavo L i crveno R:



LR faktorizacija (nastavak)

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

- postupno uništava i prepisuje elementima matrica L i R

na sljedeći način:

- elementi matrice R spremaju se u gornjem trokutu i na dijagonali,
- elementi matrice L spremaju se u donjem trokutu, s tim da se dijagonala matrice L ne sprema.
- Redosljed spremanja — kao na prošlim slikama.

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

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

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

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

Dokaz. Ide indukcijom po dimenziji matrice

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

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

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

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

Tražimo faktorizaciju matrice A_k, gdje je

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

Da bi jednadžbe bile zadovoljene, množenjem dobivamo

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

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

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

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

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

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

Egzistencija i jedinstvenost LR faktorizacije

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

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

S druge strane, matrica

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

nema LR faktorizaciju, iako je regularna. ■

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

Može se pokazati da je

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

Neka je matrica

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

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

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

pri čemu je ...

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

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

a m_{ik} su odgovarajući multiplikatori.

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

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

Veza Gaussovih eliminacija i LR faktorizacije

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

A se može napisati kao $A = M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{n-1}^{-1} \widetilde{R} := \widetilde{L}\widetilde{R}$, gdje je

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

Iz jedinstvenosti LR faktorizacije slijedi da je $\widetilde{R} = R$.

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:

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

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

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

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

Dakle, jedina razlika obzirom na parcijalno pivotiranje je

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

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: