Přednáška 16 – Gaussova el. & LU II.

opáčko: $A\vec{x} = \vec{b}$ soustava $\underline{n}$ lineárních algebr. rovnic

Řešení pomocí G.E.:

- $A\vec{x} = \vec{b} \xrightarrow{G.E.} MAx = Mb$, kde $M = M^{(n-1)} \cdot \ldots \cdot M^{(1)}$
  → M nesestavujeme, ale postupně aplikujeme $M^{(k)}$ na A i $\vec{b}$ a dostaneme $MA = A^{(n-1)} \equiv U$ & $Mb = b^{(n-1)}$
- vyřešíme $U\vec{x} = \vec{b}^{(n-1)}$

Řešení pomocí LU faktorizace:

- stejnou procedurou jako G.E. počítáme $U = A^{(n-1)}$, ale ukládáme si koeficienty definující $M^{(k)} = I - \vec{m}^{(k)} \cdot \vec{e}_k^T$.
  Pak $U = \underbrace{M^{(n-1)} \cdot \ldots \cdot M^{(1)}}_{M} \cdot A$ tj. $A = M^{-1}U \equiv LU$
- vyřešíme $L\vec{y} = \vec{b}$
- vyřešíme $U\vec{x} = \vec{y}$

Porovnání: při použití LU vlastně „navíc" sestavujeme $L = M^{-1}$ (díky tomu, že umíme explicitně vyjádřit $(M^{(k)})^{-1}$ jde opravdu jen o „sestavování") místo abychom tu matici rovnou aplikovali na $\vec{b}$.

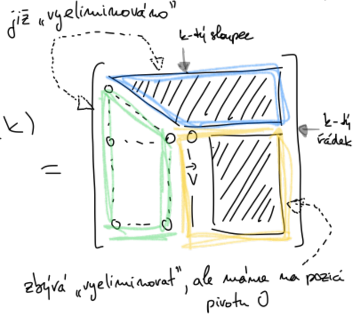
→ užitečné, pokud budu řešit mnoho systémů $A\vec{x} = \vec{b}_e$ pro různé vektory $b_1, b_2, \ldots$, které ještě nemám. Např. impl. Euler/Runge-Kutta
Pak můžu využít faktory opakovaně

→ pokud mám pouze 1 systém (nebo posloupnost, kde se mění i matice A)
⇝ je rychlejší nepočítat & neukládat $L = M^{-1}$ a rovnou použít Gaussovu eliminaci

Kdy lze takto počítat? Pokud máme nenulové pivoty, tj. pokud $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0 \ \forall k = 1, \dots, n-1$ $\left(a_{11}^{(0)} \equiv a_{11}\right)$. Maticím s touto vlastností se říká tzv. <u>silně regulární</u>.

Co když mám pouze regulární matici (tj. $\forall \vec{b} \ \exists! \vec{x}$ t. že $A\vec{x} = \vec{b}$), ale pro nějaké $k \leq n-1$ $a_{kk}^{(k-1)} = 0$ nebo ≈ 0?

Tak nechť takové $\underline{k}$ máme & rozepišeme si $A^{(k)} =$



Protože A je regulární $\Rightarrow \vec{v} \neq \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow$

$\Rightarrow \exists \ell \in \{k, \dots, n\} : v_\ell \neq 0.$

Vezměme si $\ell \leq n$: $|v_\ell| = \max_{i \leq n} |v_i|$ & prohodíme řádky $\underline{k}$ & $\underline{\ell}$ v $A^{(k)}$:

$\tilde{A}^{(k)} = P_k A^{(k)}$ ⇝ můžeme algoritmicky počítat dále s $\tilde{A}^{(k)}$ místo $A^{(k)}$.

⇝ tzv. partial pivoting (částečná pivotace)

Obecně tedy máme: $A^{(k)} = M^{(k)} \tilde{A}^{(k-1)} = M^{(k)} P_{k-1} A^{(k-1)} \dots P_{k-1}$

- je identita pokud neprohazujeme řádky
- je permutační matice pokud prohazujeme

<u>Pozorování:</u> $A^{(n-1)} = U = M^{(n-1)} \cdot P_{n-2} \cdot \ldots \cdot M^{(3)} \cdot P_2 \cdot M^{(2)} \cdot P_1 \cdot M^{(1)} \cdot P_0 \cdot A$

& $P_k M^{(k)} = P_k \left(I - \vec{m}^{(k)} \cdot \vec{e}_k^T\right) = P_k - \underbrace{P_k \vec{m}^{(k)}}_{=: \tilde{m}^{(k)}} \cdot \vec{e}_k^T = P_k - \tilde{m}^{(k)} \cdot \vec{e}_k^T \cdot P_k = \left(I - \tilde{m}^{(k)} \vec{e}_k^T\right) P_k$

odpovídá výpočtu s $\tilde{A}^{(k)}$

P_k permutuje po k-tém kroku $\Rightarrow$ pouze prohazuje (může) řádky od $k+1$ do n $\Rightarrow P_k \vec{e}_k = \vec{e}_k \Rightarrow$
$\Rightarrow \vec{e}_k^T = (P_k \vec{e}_k)^T = \vec{e}_k^T \cdot P_k^T = \vec{e}_k^T \cdot P_k$

Tedy: $A^{(n-1)} = U = M^{(n-1)} \tilde{M}^{(n-2)} \cdots \tilde{M}^{(1)} \cdot \underbrace{P_{n-2} \cdot P_{n-1} \cdots P_1 \cdot P_0}_{=: P} \cdot A$

tj. $PA = LU$ ... LU faktorizace s částečnou pivotací

$A\vec{x} = \vec{b}$ & $PA = LU$ ⇝
- vyřešíme $L\vec{y} = P^T \vec{b}$
- vyřešíme $U\vec{x} = \vec{y}$

⇝ existují i jiné pivotace ⇝ my zde vynecháme

<u>Pozorování:</u> A je regulární $\Rightarrow \exists$ matice P, L, U t. že $PA = LU$
permutační, dolní-Δ, horní-Δ

Jednoznačnost závisí na volbě pivotační strategie. Pro částečnou pivotaci jsou P, L, U jednoznačné.

<u>Věta (Wilkinson)</u>

Nechť A je regulární & má LU-faktorizaci s částečnou pivotací $PA = LU$.
Označme $\hat{P}, \hat{L}, \hat{U}$ matice získané počítačovým výpočtem v konečné aritmetice s machine-precision ε_{mach}. Pak platí:

$$\frac{\max_{i,j} |(\hat{L}\hat{U})_{ij} - (\hat{P}A)_{ij}|}{\max_{i,j} |(\hat{P}A)_{ij}|} \overset{(*)}{\leq} \frac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |(\hat{P}A)_{ij}|} \cdot \underbrace{n}_{\text{velikost systému}} \cdot \underbrace{\varepsilon_{mach}}_{\text{zaokrouhlovací přesnost}} + \mathcal{O}(\varepsilon_{mach}^2)$$

relativní chyba numerického výpočtu za pomoci G.E. s částečnou pivotací

tzv. růstový faktor ..... můžu monitorovat během výpočtu $\rightarrow$ pokud nebude příliš veliký, tak vím, že se mi zaokrouhlovací chyby příliš neakumulují

$\Rightarrow$ Gaussova eliminace s částečnou pivotací není vždy stabilní
$\rightarrow$ akumulace zaokrouhlovacích chyb může úplně zničit výpočet.
Ale v praxi se přesto běžně používá a pro mnoho konkrétních problémů lze stabilitu zaručit za využití dalších vlastností A.

Například pokud je A symetrická a pozitivně definitní (SPD).
Pak lze ukázat, že $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$ a tedy není třeba pivotace.
Když si vezmeme LU-faktorizaci $A = LU$ pak $A = A^T$, ale ta faktorizace sama o sobě symetrická není, tj. $L \neq U^T$.
Ovšem pokud napíšeme $A = L \cdot \mathrm{diag}(U) \cdot \overbrace{\mathrm{diag}(U)^{-1} U}^{R} =: LDR$
pak lze snadno ukázat, že $R^T = L$ & $D > 0$

Pro A SPD tedy můžeme provést LU-faktorizaci symetricky →

→ když získáme $A^{(n-1)} = U$ pak automaticky $L = (\mathrm{diag}(U)^{-1} U)^T$.

Klasicky se místo toho volí $L = (\mathrm{diag}(U)^{-1/2} \cdot U)$ a dostáváme

tzv. Choleského faktorizaci: $A = LL^T$.

Pro výpočet Choleského faktorizace lze ukázat:

$$\boxed{\frac{\max_{i,j} |(\hat{L}\hat{L}^T)_{ij} - a_{ij}|}{\max_{i,j} |a_{ij}|}} \overset{(*)}{\leq} 2 \cdot \underbrace{n}_{\text{velikost systému}} \cdot \overbrace{\varepsilon_{mach}}^{\text{zaokrouhlovací přesnost}} + O(\varepsilon_{mach}^2)$$

relativní chyba numerického výpočtu Choleského faktorizace

▷ ten růstový faktor lze odhadnout 2 ⇒

⇒ zaokrouhlovací chyby se neakumulují

⟹ pro A SPD je Gaussova eliminace stabilní