NUMERICKÉ METÓDY LINEÁRNEJ ALGEBRY

04. Riešenie sústavy lineárnych rovníc, Priame metódy.

Ing. Marek Macák, PhD.

Konzultácie: podľa potreby/dohody online

4. Marec 2024

Úvod - zopakovanie

- Nech $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$ a $b \in \mathbb{R}^m$, $b \neq 0$. Potom lin. systém rovníc $Ax = b$ je **konzistentný**.
- Existencia a jednoznačnosť riešenia
  - Systém $Ax = b$ je konzistentný práve vtedy, keď $b \in range(A)$, t.j. $hod(A) = hod((A, b))$.
  - Ak je systém konzistentý a stĺpce A sú lineárne nezávislé, potom riešenie $Ax = b$ je jediné.
  - Ak je systém konzistentý a stĺpce A sú lineárne závislé, potom $Ax = b$ má nekonečne veľa riešení.
  - Keď je A regulárna (t.j. $m = n$ a $det(A) \neq 0$), potom je systém konzistentný pre ľubovoľné b a má jediné riešenie.
- Homogénny systém $Ax = 0$ má netriviálne riešenie $x \neq 0$ práve vtedy, ak sú stĺpce A lin. závislé. Ak má $Ax = 0$ netriv. rieš., potom má nekonečne veľa riešení. Pri $m = n$ to nastane pre singulárnu A.

Gaussova eliminačná metóda

- **Príklad:** Gaussovou eliminačnou metódou nájdite riešenie sústavy lineárnych rovníc

$$\begin{aligned} -x_1 + x_2 + x_3 + x_4 &= 1, \\ 2x_1 - x_2 + x_3 - x_4 &= -1, \\ -x_1 - x_2 + 2x_3 + x_4 &= -2, \\ x_1 + 2x_2 + 3x_3 + x_4 &= 4. \end{aligned}$$

- Riešenie: Postupne budeme aplikovať riadkové ekvivalentné úpravy na rozšírenú maticu sústavy, aby sme ju získali v trojuholníkovom tvare

$$\left(\begin{array}{cccc|c} -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 2 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 3 & 1 & 4 \end{array}\right) \sim$$

Gaussova eliminačná metóda

$$\sim \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 & 4 \\ 2 & -1 & 1 & -1 & -1 \\ -1 & -1 & 2 & 1 & -2 \\ -1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{array}\right) \begin{array}{l} \cdot(-2) \\ + \\ + \\ + \end{array} \sim$$

$$\sim \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 & 4 \\ 0 & -5 & -5 & -3 & -9 \\ 0 & 1 & 5 & 2 & 2 \\ 0 & 3 & 4 & 2 & 5 \end{array}\right) \sim$$

Gaussova eliminačná metóda

$$\sim \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 & 4 \\ \color{blue}{0} & 1 & 5 & 2 & 2 \\ \color{blue}{0} & -5 & -5 & -3 & -9 \\ \color{blue}{0} & 3 & 4 & 2 & 5 \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ \cdot 5 \quad \cdot(-3) \\ + \\ \quad + \end{array} \sim$$

$$\sim \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 & 4 \\ \color{blue}{0} & 1 & 5 & 2 & 2 \\ \color{blue}{0} & \color{blue}{0} & 20 & 7 & 1 \\ \color{blue}{0} & \color{blue}{0} & -11 & -4 & -1 \end{array}\right) \begin{array}{l} \\ \\ \cdot 11 \\ \mid \cdot 20 \quad + \end{array} \sim$$

Gaussova eliminačná metóda

$$\sim \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & 2 & 3 & 1 & 4 \\ 0 & 1 & 5 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 20 & 7 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -3 & -9 \end{array}\right) .$$

Spätnou substitúciou dostaneme riešenie $\mathbf{x}$

$$\begin{aligned} 0 \cdot x_1 + 0 \cdot x_2 + 0 \cdot x_3 - 3 \cdot x_4 &= -9 & \Longrightarrow && x_4 &= 3, \\ 0 \cdot x_1 + 0 \cdot x_2 + 20 \cdot x_3 + 7 \cdot x_4 &= 1 & \Longrightarrow && x_3 &= -1, \\ 0 \cdot x_1 + 1 \cdot x_2 + 5 \cdot x_3 + 2 \cdot x_4 &= 2 & \Longrightarrow && x_2 &= 1, \\ 1 \cdot x_1 + 2 \cdot x_2 + 3 \cdot x_3 + 1 \cdot x_4 &= 4 & \Longrightarrow && x_1 &= 2. \end{aligned}$$

Gaussova eliminačná metóda

- Ak $A = LU$ je LU faktorizácia A, potom sústava $Ax = b$ má tvar $LUx = b$ a substitúcia $Ux = y$ vedie na riešenie pôvodnej sústavy v troch 'makro'-krokoch:
  - Vypočítaj LU fakt. matice A pomocou GE
  - Vyrieš: $Ly = b$, kde L je dolná trojuholníková matica
  - Vyrieš: $Ux = y$, kde U je horná trojuholníková matica.
- Výpočtová zložitosť: $n^3/3 + n^2$ flops.

Gaussova eliminačná metóda

- Nech $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, je dolná trojuholníková a regulárna. Potom systém $Ly = b$ sa rieši tzv. elimináciou vpred ('forward elimination'):

$$
\boxed{\begin{array}{l}
\textbf{for } k = 0, 1, \ldots, n-1 \\
\quad \textbf{if } (k = 0) \quad y[k] = b[k]/L[k][k] \\
\quad \textbf{else } y[k] = (b[k] - \sum_{j=0}^{k-1} L[k][j] * y[j]/L[k][k]; \\
\textbf{end}
\end{array}}
$$

- Nech $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$, je horná trojuholníková a regulárna. Potom systém $Ux = b$ sa rieši tzv. spätnou elimináciou ('backward elimination'):

$$
\boxed{\begin{array}{l}
\textbf{for } k = n-1, n-2, \ldots, 0 \\
\quad \textbf{if } (k = n-1) \quad x[k] = b[k]/U[k][k] \\
\quad \textbf{else } x[k] = (b[k] - \sum_{j=k+1}^{n-1} U[k][j] * x[j]/U[k][k]; \\
\textbf{end}
\end{array}}
$$

Gaussova eliminačná metóda s čiastočnou pivotizaciou

- Klasický prístup: Najprv LU fakt. A s čiastočnou pivot., a potom riešenie dvoch troj. systémov.
- Efektívnejší postup: Pracovať s rozšírenou maticou sústavy (A, b) a aplikovať GECP naraz na A aj b.
- Výpočtová zložitosť: $n^3/3$ flops $+O(n^2)$ porovnani.

Gaussova eliminačná metóda s čiastočnou pivotizaciou

for $k = 0, 1, ..., n-2$
  Nájdi $a_{r_k,k} = max|a_{ij} : k \leq i \leq n$
  for $j = k, k+1, ..., n-1$
    $a_{kj} \leftrightarrow a_{r_k,j}$
  end
  $b_k \leftrightarrow b_{r_k}$
  for $i = k+1, k+2, ..., n-1$
    $m_{ik} = -a_{ik}/a_{kk}$
  end
  for $i = k+1, k+2, ..., n-1$
    $b_i = b_i + m_{ik} * b_k$
    for $j = k+1, k+2, ..., n-1$
      $a_{ij} = a_{ij} + m_{ik} * a_{kj}$
    end
  end
end

Gaussova eliminačná metóda s čiastočnou pivotizaciou

- Po $(n-1)$ krokoch dostaneme sústavu $Ux = b^{(n-1)}$ s hornou trojuholníkovou maticou, ktorú vyriešime spätnou substitúciou.
- **Stabilita**: Nech $\tilde{x}$ je vypočítané riešenie lineárneho systému $Ax = b$ pomocou GE. Potom $\tilde{x}$ je presným riešením lin. systému s perturbovanou maticou sústavy:

$$(A+E)\tilde{x} = b, \tag{1}$$

kde:

$$||E||_{\mathsf{inf}} \leq c(n^3 + 5n^2)\rho||A||_{\mathsf{inf}}\mu, \tag{2}$$

kde ρ je faktor rastu, c je mala konštanta a μ je zaokruhľovacia chyba.

Použitie QR faktorizácie

- Postup:
  - Vypočítaj QR fakt. matice A pomocou HT alebo GT: $Q^T A = R$.
  - Sformuj: $b' = Q^T b$.
  - Vyrieš: $Rx = b'$ pomocou spätnej substitúcie.
- Na sformovanie b' nepotrebujeme Q^T explicitne, stačí nám faktorizovaná forma Q^T. Ak napr. použijeme Householderove reflexie, potom: $Q^T = H_{n-1} H_{n-2} H_1$ a $b' = Q^T b$ môžme formovať rekurzívne: $y^1 = b$; $y^{i+1} = H_i y^i$, $1 \leq i \leq n-1$; $b' = y^n$.

Použitie QR faktorizácie

- Nech $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$. Potom QR faktorizaciu vieme vykonať použitím HT transformacie:

$$
\begin{array}{|l|}
\hline
\textbf{for } k = 1, 2, ..., n \\
\quad x = R_{k:m,k} \\
\quad u_k = sign(x_1)||x||_2 e_1 + x \\
\quad u_k = u_k / ||u_k||_2 \\
\quad R_{k:m,k:n} = R_{k:m,k:n} - 2u_k(u_k * R_{k:m,k:n}) \\
\textbf{end} \\
\hline
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{|l|}
\hline
\textbf{for } k = 1, 2, ..., n \\
\quad b_{k:m} = b_{k:m} - 2u_k(u_k * b_{k:m}) \\
\textbf{end} \\
\hline
\end{array}
$$

Použitie QR faktorizácie

- Nech $\tilde{x}$ je vypočítané riešenie lin. systému $Ax = b$ s použitím Householderovej QR faktorizácie. Potom $\tilde{x}$ je presným riešením lin. systému:

$$(A + E)\tilde{x} = b + \delta b, \tag{3}$$

kde

$$\begin{aligned} ||E||_F &\leq (3n^2 + 41n)||A||_F \mu + O(\mu^2), & (4) \\ ||\delta b|| &\leq (3n^2 + 40n)||b||\mu + O(\mu^2). & (5) \end{aligned}$$

Metóda je teda spätne stabilná.

- Výpočtová zložitosť s HT: $2n^3/3$ flops a n odmocnín.
- Výpočtová zložitosť s GT: $4n^3/3$ flops a $n^2/2$ odmocnín.

Choleskyho rozklad

- Nech A je symetricky pozitývne definitná SPD rádu n. Potom existuje jednoznačná tzv. **Choleskyho faktorizácia** matice A v tvare: $A = HH^T$, kde H je dolná trojuholníková s kladnými diagonálnymi prvkami.
- Faktor H je explicitne daný ako $H = LD^{1/2}$, kde L je dolná troj. matica s jednotkami na diagonále z LU faktorizácie matice A s použitím GE bez pivotizácie a $D = diag(u_{11}^{1/2}, u_{22}^{1/2}, ..., u_{nn}^{1/2})$.
- Faktor rastu pri GE bez pivotizácie je $\rho = 1$. Takže GE bez pivotizácie je pre SPD matice stabilná.

Choleskyho rozklad

- Výpočet Choleskyho faktorizácie:

$$
\boxed{
\begin{array}{l}
\textbf{for } k = 0, 1, \ldots, n-1 \\
\quad \textbf{for } i = 0, 1, \ldots, k-1 \\
\qquad h_{ki} = \left(a_{ki} - \sum_{j=0}^{i-1} h_{ij} * h_{kj} \right) / h_{ii} \\
\quad \textbf{end} \\
\quad h_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=0}^{k-1} h_{kj}^2} \\
\textbf{end}
\end{array}
}
$$

  V tomto algoritme $\sum_{j=0}^{-1}() = 0$ a $h^{00} = \sqrt{a_{00}}$.
- Potom systém $Ax = b$ sa rieši v dvoch krokoch:
  - $Hy = b$ (dolná trojuholníková matica),
  - $H^T x = y$ (horná trojuholníková matica).

Choleskyho rozklad

- **Príklad:** Metódou Choleskyho rozkladu nájdite riešenie sústavy lineárnych rovníc

$$\begin{aligned} 4x_1 + 6x_2 - 2x_3 &= -6, \\ 6x_1 + 13x_2 + x_3 &= -5, \\ -2x_1 + x_2 + 6x_3 &= 9. \end{aligned}$$

- Riešenie: Matica A má tvar

$$\mathrm{A} = \begin{pmatrix} 4 & 6 & -2 \\ 6 & 13 & 1 \\ -2 & 1 & 6 \end{pmatrix}$$

Choleskyho rozklad

- pre prvky matice H dostaneme

$$
\begin{aligned}
h_{11} &= \sqrt{a_{11}} = \sqrt{4} = 2, \\
h_{21} &= a_{21}/h_{11} = 6/2 = 3, \\
h_{22} &= \sqrt{a_{22} - h_{21}^2} = \sqrt{13 - 3^2} = \sqrt{4} = 2, \\
h_{31} &= a_{31}/h_{11} = -2/2 = -1, \\
h_{32} &= \left(a_{32} - h_{31}h_{21}\right)/h_{22} = \left(1 - (-1)\cdot 3\right)/2 = 2, \\
h_{33} &= \sqrt{a_{33} - h_{31}^2 - h_{32}^2} = 6 - (-1)^2 - 1^2 = 1.
\end{aligned}
$$

Vypočítané prvky dosadíme do matice H

$$
\mathrm{H} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix}. \tag{6}
$$

Choleskyho rozklad

- Vypočítanú maticu H dosadíme do rovnice $Ly = b$ a *doprednou substitúciou* vypočítame prvky vektora y

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 3 & 2 & 0 \\ -1 & 2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -6 \\ -5 \\ 9 \end{pmatrix} \implies \begin{aligned} y_1 &= -3, \\ y_2 &= 2, \\ y_3 &= 2. \end{aligned}$$

- Dosadením vektora y do pravej strany sústavy $H^T x = y$ vypočítame *spätnou substitúciou* prvky vektora neznámych x

$$\begin{pmatrix} 2 & 3 & -1 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \implies \begin{aligned} x_3 &= 2, \\ x_2 &= -1, \\ x_1 &= 1. \end{aligned}$$

Choleskyho rozklad

- Nech $\tilde{x}$ je vypočítané riešenie lineárneho systému $Ax = b$ pomocou Choleskyho faktorizácie SPD matice A. Potom $\tilde{x}$ je presným riešením lin. systému s perturbovanou maticou sústavy: $(A + E)\tilde{x} = b$, kde:

$$||E||_2 \leq c_1(n)||A||_2\mu, \tag{7}$$

  a $c_1(n)$ je pomaly rastúca funkcia n.
- Relatívna chyba riešenia:

$$\frac{||x - \tilde{x}||}{||\tilde{x}||} \leq c_2(n)\kappa(A)O(\mu), \tag{8}$$

  kde $\kappa(A) = ||A||\,||A^{-1}||$ je číslo podmienenosti matice A.
- Výpočtová zložitosť: $n^3/6 + n^2$ flops a n odmocnín.

Diagonálne dominantná matica

- Matica $A = a_{ij}$ rádu n je stĺpcovo diagonálne dominantná, ak:

$$|a_{kk}| > \sum_{i=1, i \leq k}^{n} |a_{ik}| \quad k = 1, 2, ..., n. \tag{9}$$

- Matica A je riadkovo diagonálne dominantná, ak:

$$|a_{kk}| > \sum_{i=1, i \leq k}^{n} |a_{ki}| \quad k = 1, 2, ..., n. \tag{10}$$

- Faktor rastu pre GE bez pivotizácie stĺpcovo resp. riadkovo diagonálne dominantných matíc je $\rho \leq 2$. Takže tento algoritmus je pre tieto matice stabilný, nie je nutná žiadna pivotizácia.

Trojdiagonálna matica

- Trojdiagonálna matica T má LU dekompozíciu v špeciálnom tvare, kde oba faktory sú bidiagonálne matice; pre L treba vypočítať iba dolnú subdiagonálu a pre U iba diagonálu:

$$\mathrm{T} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & & \\ c_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & b_{n-1} \\ & & c_n & a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ l_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & l_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & b_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & b_{n-1} \\ & & & u_n \end{pmatrix}$$

Trojdiagonálna matica

- Algoritmus pre výpočet LU fakt.:

$$\boxed{\begin{array}{l} u_1 = a_1 \\ \textbf{for } i = 2, 3, \ldots, n \\ \quad l_i = c_i / u_{i-1} \\ \quad u_i = a_i - l_i / b_{i-1} \\ \textbf{end} \end{array}}$$

  Potom systém $Tx = b$ riešime v dvoch krokoch: $Ly = b$ a $Ux = y$.
- Ak T je zároveň SPD, potom tento postup je stabilný a má prednosť pred Choleskyho faktorizáciou, pretože nepoužíva výpočet odmocnín.
- Ak T nie je SPD, potom táto faktorizácia môže byť nestabilná a treba použiť GE s čiastočnou pivotizáciou, pre ktorú je faktor rastu $\rho \leq 2$.
- Výpočtová zložitosť: $4n$ flops s použitím horeuvedeného algoritmu LU fakt.