Metody Numeryczne, część 6
studia stacjonarne

Krystyna Ziętak

- Uwarunkowanie zadania rozwiązania układu równań liniowych $Ax = b$ (*sensitivity and conditioning*)
- Eliminacja Gaussa (*Gauss elimination*)

listopad 2018

Spis treści

Powtórka z algebry liniowej

- wyznacznik, twierdzenie Cauchy'ego, macierz osobliwa, macierz nieosobliwa, macierz odwrotna
- układ równań liniowych $Ax = b$
- rząd macierzy - największy stopień jej minora różnego od zera
- Twierdzenie Kroneckera-Capellego
- układ cramerowski - A kwadratowa i nieosobliwa
- eliminacja Gaussa

Problem I - uwarunkowanie zadania

Jak może zmienić się rozwiązanie układu $Ax = b$,
jeśli zaburzymy trochę prawą stronę układu?

Przykład (Forsythe, Moler)

$$A = \begin{bmatrix} 1.00 & 0.99 \\ 0.99 & 0.98 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{bmatrix}$$

Układ $Ax = b$ ma rozwiązanie $x = [1, 1]^T$.

Nowa prawa strona układu: $\widetilde{b} = [1.989903, 1.970106]^T$.
Nowy układ $Ay = \widetilde{b}$ ma rozwiązanie $y = [3.0000, \ -1.0203]^T$

Pytanie

Co zadecydowało, że tak mała zmiana prawej strony układu spowodowała tak drastyczną zmianę rozwiązania?

Problem II - wpływ zaokrągleń na rozwiązanie układu $Ax = b$

Rozwiązujemy układ

$$0.0001x_1 + x_2 = 1, \quad x_1 + x_2 = 2$$

za pomocą eliminacji Gaussa w zmiennopozycyjnej arytmetyce dziesiętnej z 3-cyfrową mantysą.
Dokładne rozwiązanie:

$$x_1 = 1.00010, \quad x_2 = 0.9990$$

Po wyeliminowaniu za pomocą pierwszego równania niewiadomej x_1 z drugiego równania w przyjętej arytmetyce zmiennopozycyjnej otrzymujemy $\widetilde{x}_2 = 1$. Podstawiając obliczone $\widetilde{x}_2$ do pierwszego równania otrzymamy $\widetilde{x}_1 = 0$.

DLACZEGO JEST TAK ŹLE ???

Problem I - szczegóły obliczeń

$$b = \begin{bmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{bmatrix}, \quad \widetilde{b} = \begin{bmatrix} 1.989903 \\ 1.970106 \end{bmatrix}$$

Wektor prawych stron $\widetilde{b}$ interpretujemy jako zaburzony wektor b. Zaburzenie Δb jest względnie małe

$$\Delta b = \begin{bmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1.989903 \\ 1.970106 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.000097 \\ -0.000106 \end{bmatrix}.$$

Tymczasem zmiana rozwiązania jest względnie duża:

$$x - y = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3.0000 \\ -1.0203 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2.0000 \\ 2.0203 \end{bmatrix}.$$

Jest to przykład **źle uwarunkowanego zadania**, ponieważ mała względna zmiana danych spowodowała dużą względną zmianę rozwiązania.

- Jeśli rozwiązanie jakiegoś zadania jest bardzo wrażliwe na małe względne zaburzenie danych, to mówimy, że zadanie jest **źle uwarunkowane**.
- Wielkość opisującą jak zaburzenia danych zmieniają wartość rozwiązania nazywamy **wskaźnikiem uwarunkowania zadania**.

Problem II - szczegóły

Mamy układ $Ax = b$, gdzie

$$a_{11} = 0.0001, \;\; a_{12} = a_{21} = a_{22} = 1,$$

$$b_1 = 1, \;\; b_2 = 2.$$

Po wyeliminowaniu niewiadomej x_1 z drugiego równania otrzymujemy równanie

$$\left(a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}} a_{12} \right) x_2 = b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}} b_1.$$

W przyjętej zmiennopozycyjnej arytmetyce dziesiętnej z mantysą trzycyfrową obliczone współczynniki tego równania są równe:

$$\widetilde{a}_{22} = fl\left(a_{22} - \frac{a_{21}}{a_{11}}a_{12}\right) = fl\left(1 - \frac{1}{0.0001}\right) = -10^4$$

$$\widetilde{b}_2 = fl\left(b_2 - \frac{a_{21}}{a_{11}}b_1\right) = fl\left(2 - \frac{1}{0.0001}\right) = -10^4$$

czyli obliczone w tej arytmetyce x_2 jest równe $\widetilde{x}_2 = 1$. Wobec tego z pierwszego równania otrzymujemy w tej arytmetyce $\widetilde{x}_1 = 0$.

Uwaga. Dokładna mantysa liczby $1 - 10^4 = -9999 = -0.9999 \times 10^4$ ma cztery cyfry znaczące. Musimy mantysę zaokrąglić do trzech cyfr znaczących.

$$fl(1 - 10000) = rd(-0.9999 \times 10^4) = -0.100 \times 10^5 = -10^4$$

Norma Frobeniusa

- Aby porównać dwie macierze rzeczywiste lub zespolone $A = [a_{ij}]$ i $B = [b_{ij}]$ tego samego rozmiaru, obliczamy normę ich różnicy $A - B$.
  W tym celu możemy wybrać normę Frobeniusa, która jest zdefiniowana w następujący sposób. Niech $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$. Wówczas
  $$\|A\|_F = \left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{1/2}.$$

Przykład. Niech $A = \begin{bmatrix} -2 & 3 \\ 4 & -5 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$.

Wówczas $\|A\|_F = (4+9+16+25+1+1)^{1/2} = \sqrt{56}$

Norma wektora

- Niech $x = [x_1, \ldots, x_n]^T \in \mathbb{C}^n$. Norma wektora x (norma druga ℓ_2, nazywana długścią wektora) jest zdefiniowana tak:

$$\|x\|_2 = \left(\sum_{j=1}^{n} |x_j|^2 \right)^{1/2}$$

Przykład. Niech $x = [-2, 3, 4]^T$. Wówczas

$$\|x\|_2 = \sqrt{4 + 9 + 16} = \sqrt{29}.$$

Norma Frobeniusa macierzy i norma ℓ_2 wektora mają następujące własności

$$\|Ax\|_2 \leq \|A\|_F \|x\|_2, \quad \|AB\|_F \leq \|A\|_F \|B\|_F.$$

Znane są inne normy wektorów i macierzy. Na przykład:

- Norma ℓ_∞, $x \in \mathbb{C}^n$

$$\ell_\infty(x) = \max_j |x_j|$$

- Norma spektralna $\|\cdot\|_2$

  Norma spektralna macierzy $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ jest równa pierwiastkowi z najwięszej wartości własnej macierzy $B = A^H A$.

$$\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(B)}$$

Uwaga. Wiadomo, że wszystkie wartści własne macierzy B są rzeczywiste nieujemne, $\lambda_j(B) \geq 0$.

Dalej będziemy rozpatrywać rzeczywiste układy równań liniowych.

- Jeśli rozwiązanie jakiegoś zadania jest bardzo wrażliwe na małe względne zaburzenie danych, to mówimy, że zadanie jest **źle uwarunkowane**.
- Wielkość opisującą jak zaburzenia danych zmieniają wartość rozwiązania nazywamy **wskaźnikiem uwarunkowania zadania**.

Twierdzenie 1

Niech x będzie rozwiązaniem układu $Ax = b$, gdzie $b \neq 0, \det(A) \neq 0$. Niech y będzie rozwiązaniem układu $Ay = c$. Wówczas

$$\frac{\|y - x\|}{\|x\|} \leq \frac{\|A^{-1}\| \|\Delta b\|}{\|x\|} \leq \operatorname{cond}(A) \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|},$$

gdzie $\Delta b = c - b, \qquad \operatorname{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|.$

- Wyrażenie $\|\Delta b\| / \|b\|$ jest miarą wielkości względnego zaburzenia wektora b, który jest "*daną*" w tym zadaniu.
- Wyrażenie $\operatorname{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$ opisuje jak zaburzenie wektora prawych stron wpływa na zmianę rozwiązania. Zatem możemy je przyjąć jako wskaźnik uwarunkowania zadania rozwiązania układu $Ax = b$.

Twierdzenie 2

Niech x będzie rozwiązaniem układu $Ax = b$, gdzie $b \neq 0, \det(A) \neq 0$, czyli macierz A jest nieosobliwa. Niech y będzie rozwiązaniem układu

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

gdzie zaburzenie ΔA spełnia warunek $\|A^{-1}\|\|\Delta A\| < 1$. Wówczas macierz $A + \Delta A$ jest nieosobliwa i

$$\frac{\|y - x\|}{\|x\|} \leq \frac{\operatorname{cond}(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}{1 - \operatorname{cond}(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}},$$

gdzie $\operatorname{cond}(A) = \|A\|\|A^{-1}\|$.

Wskaźnik uwarunkowania zadania rozwiązania układu $Ax = b$

Niech A będzie macierzą nieosobliwą. Wówczas wskaźnik uwarunkowania zadania rozwiązania układu $Ax = b$ jest równy

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|.$$

- Jeśli ten wskaźnik jest duży, to zadanie rozwiązania układu $Ax = b$ jest źle uwarunkowane. Wówczas krótko mówimy, że macierz A jest źle uwarunkowana.
- Duży wskaźnik uwarunkowania oznacza, że rozwiązanie może być bardzo wrażliwe na zaburzenia elementów macierzy A i wektora b.
- Zawsze mamy
$$\mathrm{cond}(A) \geq 1.$$

Ciąg dalszy przykładu (zob. początek wykładu)

Zastosujemy Twierdzenie 1.

$$A = \begin{bmatrix} 1.00 & 0.99 \\ 0.99 & 0.98 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1.99 \\ 1.97 \end{bmatrix}$$

Układ $Ax = b$ ma rozwiązanie $x = [1, 1]^T$.

Nowa prawa strona układu: $\widetilde{b} = [1.989903, 1.970106]^T$.
Nowy układ $Ay = \widetilde{b}$ ma rozwiązanie $y = [3.0000,\ -1.0203]^T$

ciąg dalszy pierwszego przykładu

$$y - x = \begin{bmatrix} 2 \\ -2.0203 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 2 \\ -2 \end{bmatrix}$$

$$\widetilde{b} - b = \begin{bmatrix} -0.000097 \\ 0.000106 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -0.0001 \\ 0.0001 \end{bmatrix}$$

$$\frac{\|y - x\|_2}{\|x\|_2} \approx \frac{\sqrt{8}}{\sqrt{2}} = \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{2}} = 2$$

$$\frac{\|\widetilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2} \approx \frac{\sqrt{2} \times 10^{-4}}{2\sqrt{2}} = \frac{10^{-4}}{2}$$

czyli

$$\frac{\|y - x\|_2}{\|x\|_2} \approx 40000 \times \frac{\|\widetilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2}$$

WNIOSEK. Małe zaburzenie (zmiana) prawej strony układu spowodowało dużą zmianę rozwiązania *ciąg dalszy pierwszego przykładu*

$$\det(A) = 1 \times 0.98 - 0.99 \times 0.99 = -10^{-4}$$

$$A^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \begin{bmatrix} 0.98 & -0.99 \\ -0.99 & 1.00 \end{bmatrix}$$

norma Frobeniusa

$$\|A\|_F = \sqrt{1 + (0.99)^2 + (0.99)^2 + (0.98)^2} \approx 2,$$

$$\|A^{-1}\|_F = 10^4 \sqrt{1 + (0.99)^2 + (0.99)^2 + (0.98)^2} \approx 2 \times 10^4$$

wskaźnik uwarunkowania (norma Frobeniusa)

$$\mathrm{cond}_F(A) = \|A\|_F \|A^{-1}\|_F \approx 4 \times 10^4$$

$$\frac{\|y-x\|_2}{\|x\|_2} \approx 40000 \times \frac{\|\widetilde{b}-b\|_2}{\|b\|_2} \approx \mathrm{cond}_F(A) \times \frac{\|\widetilde{b}-b\|_2}{\|b\|_2}$$

Twierdzenie 1 - przypomnienie

Niech x będzie rozwiązaniem układu $Ax = b$, gdzie $b \neq 0, \det(A) \neq 0$. Niech y będzie rozwiązaniem układu $Ay = c$. Wówczas

$$\frac{\|y-x\|}{\|x\|} \leq \mathrm{cond}(A)\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|},$$

gdzie $\Delta b = c - b, \qquad \mathrm{cond}(A) = \|A\|\|A^{-1}\|.$

Ten przykład pokazuje, że oszcowanie podane w twierdzeniu jest realistyczne, bo faktyczny błąd jest taki jak podano w twierdzeniu.

Uwarunkowanie zadania rozwiązania układu $Ax = b$

Zadanie rozwiązania układu $Ax = b$ jest źle uwarunkowane.

WNIOSEK. Małe zaburzenie (zmiana) prawej strony układu spowodowało dużą zmianę rozwiązania, ponieważ wskaźnik uwarunkowania jest duży.

Rozwiązywanie układu równań liniowych $Ux = b$ z nieosobliwą macierzą trójkątną górną $U = [u_{ij}]$

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$$

$$\begin{array}{ccccccccc}
u_{11}x_1 & + & u_{12}x_2 & + & \cdots & + & u_{1n}x_n & = & b_1 \\
 & & u_{22}x_2 & + & \cdots & + & u_{2n}x_n & = & b_2 \\
 & & & & \ddots & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & & & u_{nn}x_n & = & b_n
\end{array}$$

- $\det(\boldsymbol{U}) \neq 0$, czyli $u_{kk} \neq 0$ dla $k = 1, \ldots, n$.
- x_n wyznaczamy z ostatniego równania $x_n = b_n/u_{nn}$.
- dla $k = n-1, \ldots, 1$ obliczamy x_k z wzoru

$$x_k = \frac{b_k - \sum_{j=k+1}^{n} u_{kj}x_j}{u_{kk}}$$

Idea eliminacji Gaussa

- Podstawowe przekształcenie w eliminacji Gaussa: od jakiegoś równania odejmujemy stronami inne równanie pomnożone przez odpowiednią liczbę, żeby wyeliminować jakąś niewiadomą z równania.
- Strategia: kolejność eliminacji niewiadomych taka, żeby układ $Ax = b$ przekształcić do równoważnego układu z macierzą układu trójkątną górną.
- Następnie rozwiązujemy rekurencyjnie otrzymany układ równań z macierzą trójkątną górną, zaczynając od ostatniego równania.

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = -1$$
$$2x_1 - x_2 + 2x_3 = -4$$
$$4x_1 + x_2 + 4x_3 = -2$$

eliminacja x_1

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = -1$$
$$-3x_2 - 2x_3 = -2$$
$$-3x_2 - 4x_3 = 2$$

eliminacja x_2

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = -1$$
$$-3x_2 - 2x_3 = -2$$
$$-2x_3 = 4$$

Drugi etap eliminacji Gaussa: rozwiązywanie układu z macierzą trójkątną

- z ostatniego (trzeciego) równania obliczamy $x_3 = -2$
- podstawiamy x_3 do równania przedostatniego (drugiego) i obliczamy
$$x_2 = \frac{-2 + 2x_3}{-3} = \frac{-6}{-3} = 2$$
- podstawiamy x_2 i x_3 do równania pierwszego i obliczamy
$$x_1 = -1 - x_2 - 2x_3 = 1$$

Eliminacja Gaussa
wszystkie minory główne macierzy A różne od zera

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}, \qquad \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}, \quad \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$$
$$\boldsymbol{A}^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}, \qquad \boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{b}$$

$$\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\
a_{21}^{(1)}x_1 & + & a_{22}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\
\vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\
a_{n1}^{(1)}x_1 & + & a_{n2}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)}
\end{array}$$

Eliminujemy niewiadomą x_1 z równań od 2-go do n-tego.
W tym celu mnożymy 1-sze równanie przez

$$\ell_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$$

i odejmujemy od równania i-tego dla $i = 2, \ldots, n$.

Eliminacja Gaussa (cd)

Po pierwszym kroku otrzymujemy układ $\boldsymbol{A}^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)}$ (pierwsze równanie nie uległo zmianie)

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n2}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)} \end{array}$$

Eliminujemy niewiadomą x_2 z równań od 3-go do n-tego. Mnożymy 2-gie równanie przez

$$\ell_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$$

i odejmujemy od równania i-tego dla $i = 3, \ldots, n$.

Eliminacja Gaussa

Ogólnie po $k-1$ krokach ($k \geq 2$) otrzymujemy $\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(k)}$

$$
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\
 & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
 & & & \ddots & & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & a_{kk}^{(k)}x_k & +\cdots+ & a_{kn}^{(k)}x_n & = & b_k^{(k)} \\
 & & & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & a_{nk}^{(k)}x_k & +\cdots+ & a_{nn}^{(k)}x_n & = & b_n^{(k)}
\end{array}
$$

Eliminujemy niewiadomą x_k z równań od $k+1$-tego do n-tego. Mnożymy k-te równanie przez

$$\ell_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

i odejmujemy od i-tego równania dla $i = k+1, \ldots, n$.

Eliminacja Gaussa

Po $n-1$ krokach otrzymujemy układ $\boldsymbol{A}^{(n)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(n)}$ z macierzą górną trójkątną

$$\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\
 & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
 & & & \ddots & & & \vdots & & \vdots \\
 & & & & & & a_{nn}^{(n)}x_n & = & b_n^{(n)}
\end{array}$$

Schemat pierwszego etapu eliminacji Gaussa

for $k \leftarrow 1$ **to** $n-1$ **do**
  for $i \leftarrow k+1$ **to** n **do**
    $\ell_{ik} \leftarrow a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$
    for $j \leftarrow k+1$ **to** n **do**
      $a_{ij}^{(k+1)} \leftarrow a_{ij}^{(k)} - \ell_{ik} a_{kj}^{(k)}$
    end for
    $b_i^{(k+1)} \leftarrow b_i^{(k)} - \ell_{ik} b_k^{(k)}$
  end for
end for

W drugim etapie eliminacji Gaussa rozwiązujemy układ $A^{(n)}x = b^{(n)}$. Jest to układ z macierzą trójkątną.

Praktyka

- Kolejne macierze $A^{(2)}, \ldots, A^{(n)}$ są zapamiętywane na miejscu macierzy $A^{(1)} = A$. Podobnie są zapamiętywane wektory prawych stron.
- Mnożniki ℓ_{ik} nie muszą być zapamiętywane (chyba, że chcemy wyznaczyć tzw. rozkład trójkątno-trójkątny macierzy A).
- Jeśli wszystkie minory główne macierzy A są różne od zera, to algorytm eliminacji Gaussa jest wykonalny.
- W praktyce powinniśmy badać czy wszystkie $a_{kk}^{(k)}$ są różne od zera.

Elementy $a_{kk}^{(k)}$ nazywamy **elementami głównymi** (*pivots*).

Schemat pierwszego etapu eliminacji Gaussa - wersja druga

for $k \leftarrow 1$ **to** $n-1$ **do**
  for $i \leftarrow k+1$ **to** n **do**
    $c \leftarrow a_{ik}/a_{kk}$
    for $j \leftarrow k+1$ **to** n **do**
      $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - ca_{kj}$
    end for
    $b_i \leftarrow b_i - cb_k$
  end for
end for

Trzeba dopisać badanie, czy wszystkie a_{kk} są różne od zera!!!

Schemat drugiego etapu eliminacji Gaussa

$x_n \leftarrow b_n / a_{nn}$
for $k \leftarrow n-1$ **to** 1 **do**
  $x_k \leftarrow b_k$
  for $i \leftarrow k+1$ to n **do**
    $x_k \leftarrow x_k - a_{ki} x_i$
  end for
  $x_k \leftarrow x_k / a_{kk}$
end for

Wybór elementu głównego

- Wariant podstawowy metody eliminacji Gaussa może być stosowany jeżeli wszystkie elementy główne $a_{kk}^{(k)}$ $(k = 1, 2, \ldots, n)$ są różne od zera. Tak, na przykład, nie jest dla układu:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

  W tym przypadku wystarczy zamienić równania miejscami.
- W numerycznej realizacji eliminacji Gaussa ważne jest nie tylko, aby elementy $a_{kk}^{(k)}$ były różne od zera, ale by nie były zbyt małe co do wartości bezwzględnej.
- Z tych powodów stosuje się tzw. wybór elementu głównego (**pivoting**).

Wybór elementu głównego

Rozważmy układ równań (zob. Kincaid, Cheney)

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

w którym ε jest małą liczbą. Po zastosowaniu eliminacji Gaussa otrzymujemy układ z macierzą trójkątną

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 0 & 1-\varepsilon^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2-\varepsilon^{-1} \end{bmatrix}.$$

Rozwiązując, otrzymujemy

$$x_2 = (2-\varepsilon^{-1})/(1-\varepsilon^{-1}), \qquad x_1 = (1-x_2)\varepsilon^{-1}.$$

$$x_2 = \frac{2-\varepsilon^{-1}}{1-\varepsilon^{-1}} = \frac{2\varepsilon - 1}{\varepsilon - 1}, \qquad x_1 = (1-x_2)\varepsilon^{-1} = \frac{1}{1-\varepsilon}.$$

Jeżeli ε jest małe, $\mathbf{x_2 \approx 1}$, $\quad \mathbf{x_1 \approx 1}$.
Dla $\varepsilon = 10^{-8}$ mamy $\mathbf{x_1 = 1.000000010}$, $\quad \mathbf{x_2 = 0.999999990}$.

Niech $\varepsilon = 10^{-8}$ i niech obliczenia są wykonywane w arytmetyce **single**. Wówczas

$$2 - \varepsilon^{-1} \approx -\varepsilon^{-1}, \qquad 1 - \varepsilon^{-1} \approx -\varepsilon^{-1}.$$

Jeśli rozwiązania obliczamy z wzorów z eliminacji Gaussa, czyli

$$x_2 = (2-\varepsilon^{-1})/(1-\varepsilon^{-1}), \qquad x_1 = (1-x_2)\varepsilon^{-1},$$

to w arytmetyce single otrzymamy: $\mathbf{x_2 \approx 1}$, $\quad \mathbf{x_1 \approx 0}$.

Problem znika jeżeli przestawimy równania

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Stosują eliminację Gaussa, dostajemy układ

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1-\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1-2\varepsilon \end{bmatrix}.$$

Rozwiązując, otrzymujemy bardzo dokładne rozwiązanie

$$x_2 = (1-2\varepsilon)/(1-\varepsilon) \approx 1, \quad x_1 = (2-x_2) \approx 1.$$

Częściowy wybór elementu głównego

- Eliminacja Gaussa z **częściowym wyborem elementu głównego** polega na znalezieniu w $k-$tym kroku eliminacji w k-tej kolumnie macierzy $A^{(k)}$ takiego elementu $a_{pk}^{(k)}$, że

$$|a_{pk}^{(k)}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}^{(k)}|$$

i przestawieniu w macierzy $\boldsymbol{A}^{(k)}$ wiersza p-tego z k-tym oraz elementu p-tego z k-tym w wektorze $\boldsymbol{b}^{(k)}$.

Pełny wybór elementu głównego

- Eliminacja Gaussa z **pełnym wyborem elementu głównego** polega na znalezieniu w $k-$tym kroku eliminacji w macierzy $A^{(k)}$ takiego elementu $a_{p\ell}^{(k)}$, że

$$|a_{p\ell}^{(k)}| = \max_{k \le i,j \le n} |a_{ij}^{(k)}|$$

  i przestawieniu w macierzy $\boldsymbol{A}^{(k)}$ wiersza p-tego z k-tym, kolumny ℓ-tej z k-tą oraz elementu p-tego z k-tym w wektorze $\boldsymbol{b}^{(k)}$.

Przykład drugi
Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = -1$$

$$2x_1 - x_2 + 2x_3 = -4$$

$$-4x_1 - x_2 - 4x_3 = 2$$

częściowy wybór elementu głównego

$$-4x_1 - x_2 - 4x_3 = 2$$

$$2x_1 - x_2 + 2x_3 = -4$$

$$x_1 + x_2 + 2x_3 = -1$$

ciąg dalszy drugiego przykładu
eliminacja niewiadomej x_1

$$-4x_1 - x_2 - 4x_3 = 2$$

$$\left(2 + \frac{1}{2}(-4)\right) x_1 + \left(-1 + \frac{1}{2}(-1)\right) x_2 + (2 + \frac{1}{2}(-4)x_3 = -4 + \frac{1}{2}(2)$$

$$\left(1 + \frac{1}{4}(-4)\right) x_1 + \left(1 + \frac{1}{4}(-1)\right) x_2 + \left(2 + \frac{1}{4}(-4)\right) x_3 = -1 + \frac{1}{4}(2)$$

$$-4x_1 - x_2 - 4x_3 = 2$$
$$-\frac{3}{2}x_2 = -3$$
$$\frac{3}{4}x_2 + x_3 = -\frac{1}{2}$$

ciąg dalszy drugiego przykładu

eliminacja niewiadomej x_2

$$-4x_1 - x_2 - 4x_3 = 2$$
$$-\frac{3}{2}x_2 = -3$$
$$\left(\frac{3}{4} + \frac{1}{2}(-\frac{3}{2})\right) x_2 + x_3 = -\frac{1}{2} + \frac{1}{2}(-3)$$

czyli z ostatniego równania otrzymujemy $x_3 = -2$, z drugiego obliczamy $x_2 = 2$ i z pierwszego równania $x_1 = 1$.

Uwaga. Nie przestawiliśmy równania drugiego z trzecim, bo w drugim równaniu aktualny współczynnik przy niewiadomej x_2 miał moduł większy niż współczynnik przy x_2 w równaniu trzecim.

Przykład trzeci

$$A = \begin{bmatrix} 0.78 & 0.563 \\ 0.913 & 0.659 \end{bmatrix}, \quad b = [0.217, 0.254]^T.$$

Dokładnym rozwiązaniem jest $x = [1, -1]^T$.
Dane są dwa przybliżenia rozwiązania

$$\hat{x} = [0.999, -1.001]^T, \quad \tilde{x} = [0.341, -0.087]^T.$$

Oblicz residua $\hat{r} = b - A\hat{x}, \quad \tilde{r} = b - A\tilde{x}$.

$$\hat{r} = [0.001343, 0.00157230]^T, \qquad \tilde{r} = [10^{-6}, -2.08 \times 10^{-17}]^T$$

Wniosek. Z tego, że residuum jest małe, nie musi wynikać, że mamy dobre przybliżenie rozwiązania.

Podsumowanie

- Normy wektorów i macierzy
- Uwarunkowanie zadania rozwiązania układu równań liniowych
- Wskaźnik uwarunkowania
- Rozwiązywanie układów z macierzą trójkątną
- Dwa etapy eliminacji Gaussa - schematy
- Wybór elementu głównego - częściowy i pełny