Riešenie sústavy lineárnych rovníc. Priame metódy.

Ing. Gabriel Okša, CSc.

Matematický ústav
Slovenská akadémia vied
Bratislava

Stavebná fakulta STU

Obsah

Základy

- 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, ak existuje vektor $x^\star$ taký, že $A\,x^\star = b$. V opačnom prípade je nekonzistentný.
- **Veta: Existencia a jednoznačnosť riešenia**
  1. Systém $Ax = b$ je konzistentný práve vtedy, keď $b \in \mathrm{range}(A)$, t.j. $\mathrm{hod}(A) = \mathrm{hod}((A, b))$.
  2. Ak je systém konzistentý a stĺpce A sú lineárne nezávislé, potom riešenie je jediné.
  3. Ak je systém konzistentý a stĺpce A sú lineárne závislé, potom $Ax = b$ má nekonečne veľa riešení.
  4. 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.

Systémy s trojuholníkovou maticou

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

1. **for** $(k = 0;\ k < n;\ k++)\ \{$
2. **if** $(k == 0)\ y[k] = b[k]/L[k][k];$
3. **else** $y[k] = \left(b[k] - \sum_{j=0}^{k-1} L[k][j] * y[j]\right)/L[k][k];\ \}$

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

1. **for** $(k = n-1;\ k >= 0;\ k--)\ \{$
2. **if** $(k == n-1)\ x[k] = b[k]/U[k][k];$
3. **else** $x[k] = \left(b[k] - \sum_{j=k+1}^{n-1} U[k][j] * x[j]\right)/U[k][k];\ \}$

Použitie Gaussovej eliminácie (GE) bez pivotizácie

Ak $A = L\,U$ 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:

1. Vypočítaj LU fakt. matice A pomocou GE.
2. Vyrieš: $Ly = b$, kde L je dolná trojuholníková matica.
3. Vyrieš: $Ux = y$, kde U je horná trojuholníková matica.

Výpočtová zložitosť: $n^3/3 + n^2$ flops.

Použitie GE s čiastočnou pivotizáciou (GEPP) - 1/2

Klasický prístup: Najprv LU fakt. A s čiast. pivot., a potom riešenie dvoch troj. systémov.
Efektívnejší postup: Pracovať s rozšírenou maticou sústavy (A, b) a aplikovať GEPP naraz na A aj b.

1. **for** $(k = 0;\ k < n - 1;\ k++)$ { // cyklus cez stĺpce
2. Nájdi: $a_{r_k,k} = \max\{|a_{ik}| :\ k \leq i \leq n\}$;
   // Výmena riadkov - čiastočná pivotizácia
3. **for** $(j = k;\ j < n;\ j++)$ $a_{kj} \leftrightarrow a_{r_k,j}$;
4. $b_k \leftrightarrow b_{r_k}$;
   // Výpočet činiteľov
5. **for** $(i = k + 1;\ i < n;\ i++)$ $m_{ik} = -a_{ik}/a_{kk}$;

GEPP - 2/2

// Update A a b

6. **for** $(i = k+1;\ i < n;\ i++)\ \{$
7. $\quad b_i = b_i + m_{ik} * b_k;$
8. $\quad$ **for** $(j = k+1;\ j < n;\ j++)\ a_{ij} = a_{ij} + m_{ik} * a_{kj};\ \}$
9. $\}$ // koniec cyklu cez k

Po $(n-1)$ krokoch dostaneme sústavu $Ux = b^{(n-1)}$ s hornou trojuholníkovou maticou, ktorú vyriešime spätnou substitúciou.

Stabilita: Nech $\hat{x}$ je vypočítané riešenie lineárneho systému $Ax = b$ pomocou GE. Potom $\hat{x}$ je presným riešením lin. systému s perturbovanou maticou sústavy: $(A+E)\hat{x} = b$, kde:

$$\|E\|_\infty \leq c\,(n^3 + 5\,n^2)\,\rho\,\|A\|_\infty\,\mu,$$

kde ρ je faktor rastu (rôzny pre rôzne varianty GE), c je malá konštanta a μ je jednotka zaokrúhlenia ('round-off unit').
Výp. zložitosť s GEPP: $n^3/3$ flops a $O(n^2)$ porovnaní.

Použitie QR faktorizácie - 1/2

Riešenie $Ax = b$ s použitím QR faktorizácie matice sústavy A:

1. Vypočítaj QR fakt. matice A pomocou HT alebo GT: $Q^T A = R$.
2. Sformuj: $b' = Q^T b$.
3. 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:
$Q^T = H_{n-1} H_{n-2} \cdots H_1$
a $b' = Q^T b$ môžme formovať rekurzívne:
$y_1 = b;\ y_{i+1} = H_i y_i,\ 1 \leq i \leq n-1;\ b' = y_n$.
Navyše, vektory u_i pre jednotlivé H_i nemusíme ukladať, pretože H_i môžme aplikovať súčasne na $A^{(i)}$ aj y_i; čiže pracujeme s rozšírenou maticou (A, b).

Použitie QR faktorizácie - 2/2

Stabilita (Lawson a Hanson, 1974): Nech $\hat{x}$ je vypočítané riešenie lin. systému $Ax = b$ s použitím Householderovej QR faktorizácie. Potom $\hat{x}$ je presným riešením lin. systému:

$(A + E)\hat{x} = b + \delta b,$

kde:

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

Metóda je teda <u>spätne stabilná</u>.

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

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

Symetrická a pozitívne definitná matica - 1/3

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

SPD matica - 2/3

Výpočet Choleskyho faktorizácie: V praxi sa Choleskyho faktorizácie sa nepočíta pomocou Gaussovej eliminácie, ale takto:

1. **for** $(k = 0;\ k < n;\ k++)\ \{$
2. **for** $(i = 0;\ i < k;\ i++)\ h_{ki} = \left(a_{ki} - \sum_{j=0}^{i-1} h_{ij} * h_{kj}\right) / h_{ii};$
3. $h_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=0}^{k-1} h_{kj}^2};\ \}$

V tomto algoritme $\sum_{j=0}^{-1}() = 0$ a $h_{00} = \sqrt{a_{00}}$.

Potom systém $Ax = b$ sa rieši v dvoch krokoch:

1. $Hy = b$ (dolná trojuholníková matica);
2. $H^T x = y$ (horná trojuholníková matica).

SPD matica - 3/3

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

$\|E\|_2 \leq c_1(n)\, \|A\|_2\, \mu$,

a $c_1(n)$ je pomaly rastúca funkcia n.

Relatívna chyba riešenia:

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

kde $\kappa(A) = \|A\|\, \|A^{-1}\|$ je <u>číslo podmienenosti</u> matice A.

Výpočtová zložitosť: $n^3/6 + n^2$ flops a n odmocnín.

Diagonálne dominantná matica

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

$$|a_{kk}| > \sum_{i=1, i \neq k}^{n} |a_{ik}| \quad \forall k = 1, 2, \ldots, n.$$

Podobne je A riadkovo diagonálne dominantná, ak:

$$|a_{kk}| > \sum_{i=1, i \neq k}^{n} |a_{ki}| \quad \forall k = 1, 2, \ldots, n.$$

- **Stabilita**: 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. $\square$

Trojdiagonálna matica - 1/2

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:

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

$$\begin{pmatrix} 1 & & & \\ \ell_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ell_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_1 & b_1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & b_{n-1} \\ & & & u_n \end{pmatrix} .$$

Trojdiagonálna matica - 2/2

Algoritmus pre výpočet LU fakt. trojdiagonálnej matice:

1. $u_1 = a_1$;
2. **for** $(i = 2;\ i <= n;\ i++)$ $\{$
3. $\quad \ell_i = c_i / u_{i-1}$;
4. $\quad u_i = a_i - \ell_i * b_{i-1};\ \}$

Potom systém $Tx = b$ riešime v dvoch krokoch: $Ly = b$ a $Ux = y$.

Stabilita: 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.

Cvičenie

1. Naprogramujte v jazyku C elimináciu vpred a spätnú substitúciu pre náhodné trojuholníkové matice a náhodné pravé strany.
2. Naprogramujte v C riešenie $Ax = b$ pre náhodné A a b s využitím QR faktorizácie matice A pomocou Householderových reflexií.
3. Naprogramujte v C riešenie $Ax = b$ pre náhodné A a b s využitím LU faktorizácie matice A pomocou Gaussovej eliminácie s čiastočnou pivotizáciou.