Numerické metody a statistika

Radek Kučera

VŠB-TU Ostrava

2016-2017

Přímé metody řešení soustav lineárních rovnic

Formulace úlohy

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$$

- $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ je čtvercová matice řádu n
- $\boldsymbol{b} = (b_i)$ je sloupcový vektor o n složkách
- $\boldsymbol{x} = (x_j)$ je sloupcový vektor neznámých o n složkách
- Předpoklad: existuje jediné řešení $\boldsymbol{x}$

Příklad

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + x_3 &= 6 \\ 2x_1 + 4x_2 + 2x_3 &= 16 \\ -x_1 + 5x_2 - 4x_3 &= -3 \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ -1 & 5 & -4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 16 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Některé nevhodné metody: vzorce

- Cramerovo pravidlo:

$$x_i = \frac{\det \boldsymbol{A}_i}{\det \boldsymbol{A}}$$

i-tý slopec matice $\boldsymbol{A}$ je nahrazen v matici $\boldsymbol{A}_i$ vektorem

- extrémně časově náročné

- Vyjádření řešení pomocí inverzní matice:

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$$

- výpočet $\boldsymbol{A}^{-1}$ vyžaduje řešit několik lineárních soustav

Akce $\boldsymbol{A}^{-1}$

- naopak $\boldsymbol{A}^{-1}$ se ve výrazu převádí na řešení soustavy

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{B}_2\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{c} \iff \boldsymbol{b} = \boldsymbol{B}_1\boldsymbol{c},\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b},\ \boldsymbol{y} = \boldsymbol{B}_2\boldsymbol{x}$$

Gaussova eliminační metoda (GEM)

Eliminace (základ přímých metod)

- přičtením nenulového násobku jedné rovnice k jiné rovnici se nezmění řešení
- pomocí první rovnice vyeliminujeme x_1 ve 2. až poslední rovnici
- pomocí druhé rovnice vyeliminujeme x_2 ve 3. až poslední rovnici
- ...

Dvě části GEM

- dopředný chod: pomocí eliminací upravujeme výchozí soustavu $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ na ekvivalentní soustavu $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$ s horní trojúhelníkovou maticí $\boldsymbol{U}$
- zpětný chod: výpočet řešení $\boldsymbol{x}$ ze soustavy $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$ od konce, tj. nejdříve vypočítáme x_n pak x_{n-1} až nakonec x_1

Dopředný chod GEM

- má $n-1$ fází, $\boldsymbol{A}_k = (a_{ij}^{(k)})$, $\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{A}$ až $\boldsymbol{A}_n = \boldsymbol{U}$
- hlavní prvek (pivot) k-té fáze: $a_{kk}^{(k)} \quad (\neq 0)$
- multiplikátory k-té fáze: $m_{ik} = -a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)}$, $i = k+1, \dots, n$
- eliminace v k-té fázi: $a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} + m_{ik} a_{kj}^{(k)}$, $j = k+1, \dots, n+1$

Pracnost dopředného chodu

- tři do sebe vnořené cykly (fáze, řádky, sloupce)
- počet operací je asi $\mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3)$

$$\sum_{k=1}^{n-1}(1+2(n-k+1))(n-k) \approx 2\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2 = 2\sum_{k=1}^{n-1}k^2 \approx \frac{2}{3}n^3$$

Zpětný chod GEM

- dva do sebe vnořené cykly
- počet operací je asi $\mathcal{O}(n^2)$

$$\sum_{k=1}^{n}(1+2(k-1)) \approx 2\sum_{k=1}^{n} k \approx n^2$$

Výběr hlavního prvku

- hlavní prvek musí být nenulový
- velký hlavní prvek stabilizuje výpočet

$$\text{najdi index } p: \quad |a_{pk}^{(k)}| = \max_{i \geq k} |a_{ik}^{(k)}|$$

přehoď k–tý a p–tý řádek

LU–rozklad

Princip

- GEM na maticové úrovni
- k matici $\boldsymbol{A}$ hledáme dolní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{L}$ a horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{U}$ tak, že platí

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$$

Příklad

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ -1 & 5 & -4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ -1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

Jak na to? Pomocí GEM (pro $n = 3$).

$$\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{A} \qquad \boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{M}_1 \boldsymbol{A}_1 \qquad \boldsymbol{U} = \boldsymbol{A}_3 = \boldsymbol{M}_2 \boldsymbol{A}_2$$

$$\boldsymbol{U} = \boldsymbol{M}_2 \boldsymbol{M}_1 \boldsymbol{A} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{M}_1^{-1} \boldsymbol{M}_2^{-1} \boldsymbol{U} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{M}_1^{-1} \boldsymbol{M}_2^{-1}$$

Věta

Nechť $\boldsymbol{A}$ je čtvercová matice řádu n taková, že ji lze dopředným chodem GEM upravit na horní trojúhelníkovou matici $\boldsymbol{U}$. Položíme-li v $\boldsymbol{L} = (l_{ik})$, $l_{ik} = -m_{ik}$, $i > k$, $l_{kk} = 1$ a $l_{ik} = 0$, $i < k$, pak platí:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$$

Věta (obecný případ)

Pro obecnou čtvercovou matici $\boldsymbol{A}$ platí, že existuje dolní trojúhelníková matice $\boldsymbol{L}$, horní trojúhelníková matice $\boldsymbol{U}$ a permutační matice $\boldsymbol{P}$ takové, že platí:

$$\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU}$$

$\boldsymbol{PA}$ vyjadřuje změnu pořadí řádků vzniklou při výběru hlavního prvku

Postup výpočtu

- vytvoříme $\widetilde{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{A}$, $\widetilde{\boldsymbol{P}} = \boldsymbol{I}$, $\widetilde{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{I}$
- v $\widetilde{\boldsymbol{U}}$ provádíme GEM s výběrem hlavního prvku
- v $\widetilde{\boldsymbol{P}}$ přehazujeme řádky stejně jako v $\widetilde{\boldsymbol{U}}$
- do $\widetilde{\boldsymbol{L}}$ postupně zapisujeme multiplikátory a přehazujeme řádky i sloupce stejně jako v $\widetilde{\boldsymbol{U}}$
- nakonec $\widetilde{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{U}$, $\widetilde{\boldsymbol{P}} = \boldsymbol{P}$, $\widetilde{\boldsymbol{L}} = \boldsymbol{L}$

Příklad

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 4 & 2 \\ -1 & 5 & -4 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 7 & -3 \\ 0 & 0 & -3/7 \end{pmatrix}$$

Řešení soustav pomocí LU–rozkladu

Princip

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{PAx} = \boldsymbol{Pb} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{LUx} = \boldsymbol{Pb}$$

Součin na levé straně poslední rovnosti rozložíme:

$$\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{Pb} \qquad \boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$$

Algoritmus

1. Vypočti LU-lozklad $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{LU}$.
2. Vyřeš lineární soustavu $\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{Pb}$.
3. Vyřeš lineární soustavu $\boldsymbol{Ux} = \boldsymbol{y}$.

Pracnost: $\mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3) + 2\mathcal{O}(n^2) = \mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3)$

Příklad

- $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{b}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 \\ -3 \\ 6 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 16 \\ 5 \\ -9/7 \end{pmatrix}$$

- $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 7 & -3 \\ 0 & 0 & -3/7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 \\ 5 \\ -9/7 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Výpočet inverzní matice pomocí LU–rozkladu

Princip

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I} \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{A}[\boldsymbol{a}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{a}^{(n)}] = [\boldsymbol{e}^{(1)}, \ldots, \boldsymbol{e}^{(n)}] \;\Leftrightarrow\; \boldsymbol{A}\boldsymbol{a}^{(i)} = \boldsymbol{e}^{(i)} \;\forall i$$

Dostáváme n lineárních soustav pro jednotlivé sloupce inverzní matice.

Algoritmus

1. Vypočti LU-lozklad $\boldsymbol{P}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$.

Pro $i = 1, \ldots, n$ opakuj:

2. Vyřeš lineární soustavu $\boldsymbol{L}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{e}^{(i)}$.
3. Vyřeš lineární soustavu $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}$ a polož $\boldsymbol{a}^{(i)} = \boldsymbol{x}$.

Pracnost: $\mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3) + 2n\mathcal{O}(n^2) = \mathcal{O}(\frac{8}{3}n^3)$

Příklad

První sloupec:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 7 & -3 \\ 0 & 0 & -3/7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 13/3 \\ -1 \\ -7/3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{a}^{(1)}$$

Druhý sloupec:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \\ -3/7 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 7 & -3 \\ 0 & 0 & -3/7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1/2 \\ -3/7 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} -3/2 \\ 1/2 \\ 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{a}^{(2)}$$

Třetí sloupec:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/2 & 1 & 0 \\ 1/2 & -1/7 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{y} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1/7 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & 2 \\ 0 & 7 & -3 \\ 0 & 0 & -3/7 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1/7 \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} 1/3 \\ 0 \\ -1/3 \end{pmatrix} = \boldsymbol{a}^{(2)}$$

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 13/3 & -3/2 & 1/3 \\ -1 & 1/2 & 0 \\ -7/3 & 1 & -1/3 \end{pmatrix}$$

Výpočet determinantu pomocí LU–rozkladu

Princip

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{U} \;\Rightarrow\; \det \boldsymbol{A} = \det(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}) = \det \boldsymbol{P}^{-1} \det \boldsymbol{L} \det \boldsymbol{U}$$

- $\det \boldsymbol{P} = \pm 1$, protože podle $\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^\top = \boldsymbol{I}$ je $(\det \boldsymbol{P})^2 = 1$
- determinanty $\boldsymbol{L}$ a $\boldsymbol{U}$ vypočítáme součinem diagonálních členů

Pracnost: $\mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3) + 2n = \mathcal{O}(\frac{2}{3}n^3)$

Příklad

$$\det \boldsymbol{P} = 1 \qquad \det \boldsymbol{L} = 1 \qquad \det \boldsymbol{U} = 2 \cdot 7 \cdot (-3/7) = -6$$

$$\det \boldsymbol{A} = -6$$

Maticové normy, podmíněnost matic

Definice

Nechť $\boldsymbol{A}$,$\boldsymbol{B}$ jsou matice typu $m \times n$. Zobrazení, které matici $\boldsymbol{A}$ přiřazuje číslo $\|\boldsymbol{A}\|$ se nazývá maticová norma, jestliže platí:

1. $\|\boldsymbol{A}\| \geq 0$ a $\|\boldsymbol{A}\| = 0$ jen pro nulovou matici,
2. $\|\alpha \boldsymbol{A}\| = |\alpha| \cdot \|\boldsymbol{A}\|$ pro každé reálné číslo α,
3. $\|\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}\| \leq \|\boldsymbol{A}\| + \|\boldsymbol{B}\|$.

Příklady norem

- řádková, sloupcová, Frobeniova:

$$\|\boldsymbol{A}\|_R = \max_i \sum_j |a_{ij}|, \quad \|\boldsymbol{A}\|_S = \max_j \sum_i |a_{ij}|, \quad \|\boldsymbol{A}\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2}$$

Příklad

$$\|\boldsymbol{A}\|_R = 10, \quad \|\boldsymbol{A}\|_S = 10, \quad \|\boldsymbol{A}\|_F = 8.3064$$

Věta

Nechť $\boldsymbol{A}$ je typu $m \times n$ a $\boldsymbol{B}$ je typu $n \times p$. Pro každou z uvedných norem platí:

$$\|\boldsymbol{AB}\| \leq \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{B}\|.$$

Definice

Číslo podmíněnosti regulární čtvercové matice $\boldsymbol{A}$ je:

$$\kappa(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\|$$

Věta

Nechť $\boldsymbol{A}$ je regulární čtvercová matice a platí $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, $\boldsymbol{A\bar{x}} = \boldsymbol{\bar{b}}$. Pak:

$$\frac{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\bar{x}}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leq \kappa(\boldsymbol{A}) \frac{\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\bar{b}}\|}{\|\boldsymbol{b}\|} \tag{1}$$

Důkaz:

$$\|\boldsymbol{b}\| = \|\boldsymbol{Ax}\| \leq \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{x}\| \quad \Rightarrow \quad \|\boldsymbol{x}\|^{-1} \leq \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{b}\|^{-1}$$

$$\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\bar{x}}\| = \|\boldsymbol{A}^{-1}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\bar{b}})\| \leq \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\bar{b}}\|$$

Vynásobíme levé a pravé strany nerovností:

$$\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{\bar{x}}\| \cdot \|\boldsymbol{x}\|^{-1} \leq \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\boldsymbol{b}\|^{-1} \cdot \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{\bar{b}}\| \quad \Rightarrow \quad (1)$$

Poznámka

Hodnota $\kappa(\boldsymbol{A})$ určuje, jak jsou citlivé výpočty s maticí $\boldsymbol{A}$ na poruchy (např. na zaokrouhlování).

- $\kappa(\boldsymbol{A}) \approx 1$ ... malá citlivost (dobře podmíněná matice)
- $\kappa(\boldsymbol{A}) \gg 1$ ... velká citlivost (špatně podmíněná matice)

Příklad (pro Hilbertovu matici)

n	$\kappa(\boldsymbol{A})$	$\lVert \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} - \boldsymbol{I} \rVert$
5	4.8×10^{5}	1.4×10^{-11}
10	1.6×10^{13}	3.3×10^{-3}
15	1.1×10^{18}	2.8×10^{3}
20	2.5×10^{28}	2.6×10^{11}
25	1.0×10^{36}	1.3×10^{19}

Poznámka

Kritickou hodnotou $\kappa(\boldsymbol{A})$ je převrácená hodnota počítačového epsilon, tj. asi 10^{16}.

Souhrn

- Gaussova eliminační metoda, její pracnost
- LU-rozklad a jeho výpočet
- použití LU-rozkladu ve výpočtech
- číslo podmíněnosti matice

Zdroj

- skripta Numerické metody
- str. 40–65