

V Wykład: 19 XI 10 r.

Wrócimy jeszcze do rozwiązywania układu równań *metodą eliminacji Gaussa* przedstawionej na wykładzie z dnia 29 X 10 r. oraz problemu obliczeniowego wynikającego z przykładu. W trakcie eliminacji niewiadomych w metodzie Gaussa powstają macierze postaci

$$\left[\begin{array}{ccc|c|cc} X & \dots & X & X & \dots & X \\ & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & X & X & \dots & X \\ \hline 0 & \dots & 0 & a_{kk} & \dots & a_{kn} \\ \hline \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{nk} & \dots & a_{nn} \end{array} \right]$$

gdzie¹ X -em są zaznaczone elementy macierzy niekoniecznie równe zero. W kolejnym k -tym kroku wymagane jest aby $a_{kk} \neq 0$, gdyby ten warunek nie był spełniony to wystarczy wśród $a_{kk}, \dots, a_{nk}$ znaleźć element niezerowy (istnienie wynika z nieosobliwości macierzy) i zamienić odpowiednie wiersze. Z uwagi na dokładność obliczeń wybór l -tego wiersza spełniającego $|a_{lk}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$ (*częściowy wybór elementu podstawowego*, „*partial pivoting*”) poprawia dokładność obliczeń. Jeszcze większą dokładność można otrzymać uwzględniając w wyborze pozostałe kolumny macierzy $|a_{lm}| = \max_{k \leq i \leq n} \max_{k \leq j \leq n} |a_{ij}|$ (*pełny wybór elementu podstawowego*, „*complete pivoting*”). Tak wybrany element przez zamianę wierszy i kolumn umieszczamy na miejscu (k, k) itd. W przypadku rozwiązywania dużych układów równań wybór ten może być kłopotliwy.

Rozważa się oddzielnie macierze z dużą ilością zer (wzory rozwiązujące pozostają te same, można jedynie oszczędniej zapisać macierz w komputerze). Takim przykładem jest macierz *Hessenberga* gdzie dla $i > j + 1 \implies a_{ij} = 0$ i pasmowa (*trójdzielna*) gdzie z $|i - j| > 1 \implies a_{ij} = 0$:

$$\left[\begin{array}{ccccccc} X & X & X & \dots & X & X & X \\ X & X & X & \dots & X & X & X \\ 0 & X & X & \dots & X & X & X \\ 0 & 0 & X & \dots & X & X & X \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & X & X \end{array} \right], \left[\begin{array}{ccccccc} d_1 & c_1 & & & & & \\ a_1 & d_2 & c_2 & & & & \\ & a_2 & d_3 & c_3 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & a_{-2} & d_{n-1} & c_{n-1} & \\ & & & & a_{n-1} & d_n & \end{array} \right].$$

ANALIZA BŁĘDÓW^{2 3 4 5 6}**V-1.1 Definicja**

Dla macierzy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

funkcję $\|\cdot\| : \mathbb{R}^{n \times n} \rightarrow \mathbb{R}_+$ nazywamy normą macierzową, gdy ma następujące własności

¹ za J. Wilkinson'em

² D. Kincaid & W. Cheney, *Numerical Analysis*, ss. 181–221;

³ G.W. Stewart, *Afternotes on Numerical Analysis*, ss. 103–131;

⁴ A. Ralston, *Wstęp do analizy numerycznej*, ss. 365–392;

⁵ R.L. Burden, J.D. Faires & A.C. Reynolds, *Numerical Analysis*, ss. 289–317;

⁶ H. Rutishauser, *Lectures on Numerical Mathematics*, ss. 23–76;

1. $\|A\| \geq 0$, oraz $\|A\| = 0 \iff A = 0$,
2. $\|cA\| = |c|\|A\|$, $c \in \mathbb{R}$,
3. $\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$,
4. $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$.

Typowe normy

$$\begin{aligned}\|A\|_2 &= \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2} && (\text{norma euklidesowa, } \ell_2\text{-norma}) \\ \|A\|_S &= \max_i \sqrt{\lambda_i(AA^T)} && (\text{norma spektralna})\end{aligned}$$

Gdzie w definicji *normy⁷ spektralnej* $\|A\|_S$ symbolem $\lambda_i(AA^T)$ oznaczono i -tą wartość własną macierzy AA^T .

UWAGA Z macierzą $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jest związane wzorem

$$f(x) = Ax$$

przekształcenie liniowe $f : \mathbb{R}^n \longrightarrow \mathbb{R}^n$. Przy tak przyjętych oznaczeniach mamy

$$\|A\| = \|f\| \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{\|x\|=1} \|f(x)\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|f(x)\|}{\|x\|}.$$

INACZEJ, norma macierzy $\|A\|$ jest normą operatorową przekształcenia $y = f(x)$ wyznaczonego przez tę macierz.

OGÓLNIE, dla przekształcenia $f : \mathbb{B}_1 \longrightarrow \mathbb{B}_2$, gdzie $\mathbb{B}_1, \mathbb{B}_2$ – przestrzenie unormowane, rozważa się klasę przekształceń ograniczonych. Dla takich przekształceń

$$\|f\| \stackrel{\text{def}}{=} \sup_{x \neq 0} \frac{\|f(x)\|}{\|x\|}$$

jest normą.

Normy w przestrzeniach $\mathbb{R}^n$:

$$\begin{aligned}\|x\|_1 &= \sum_{i=1}^n |x_i| && \ell_1\text{-norma,} \\ \|x\|_2 &= \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2} && \ell_2\text{-norma, norma euklidesowa,} \\ \|x\|_\infty &= \max_{1 \leq i \leq n} |x_i| && \ell_\infty\text{-norma,}\end{aligned}$$

gdzie $x^T = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in \mathbb{R}^n$.

V-1.2 Lemat

Jeżeli przestrzeń $\mathbb{R}^n$ jest z normą $\|x\| = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i|$, $x \in \mathbb{R}^n$ to dla $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ zachodzi

$$\|A\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|.$$

⁷ I.M. Gelfand, *Wykłady z algebry liniowej*, PWN, Warszawa 1971.

Uzasadnienie

$$\begin{aligned}
\|A\|_\infty &= \sup_{\|u\|_\infty=1} \|Au\|_\infty = \sup_{\|u\|_\infty=1} \left\{ \max_{1 \leq i \leq n} |(Au)_i| \right\} = \\
&= \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sup_{\|u\|_\infty=1} |(Au)_i| \right\} = \max_{1 \leq i \leq n} \left\{ \sup_{\|u\|_\infty=1} |(Au)_i| \right\} = \\
&= \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|
\end{aligned}$$

gdzie kres górny $\sup_{\|u\|_\infty=1} \left| \sum_{j=1}^n a_{ij} u_j \right| = \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$, $i = 1, \dots, n$ jest realizowany przez $\|u\|_\infty = 1$ określone w następujący sposób $u_j = \operatorname{sgn} a_{ij}$, $i = 1, \dots, n$.

□

PRZYKŁAD I

Niech $x \in \mathbb{R}^n$ będzie rozwiązaniem dokładnym równania

$$Ax = b$$

a $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ równania zaburzonego

$$B\tilde{x} = b.$$

Pytanie: *Jaki jest błąd względny otrzymanego wyniku ?*

Rozwiązanie:

Mamy

$$\begin{aligned}
x &= A^{-1}b \quad - \text{rozwiązanie dokładne,} \\
\tilde{x} &= B^{-1}b \quad - \text{rozwiązanie przybliżone.}
\end{aligned}$$

Stąd wynika

$$\|x - \tilde{x}\| = \|x - Bx\| = \|x - BA^{-1}x\| = \|(I - BA^{-1})x\| \leq \|I - BA^{-1}\| \|x\|$$

Co daje następujące oszacowanie błędu względnego

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \|I - BA^{-1}\|.$$

□

PRZYKŁAD II

Macierze układów są dokładne, natomiast prawe strony są zaburzone, tzn.

$$\begin{aligned}
Ax &= b \quad - \text{równanie „dokładne”,} \\
A\tilde{x} &= \tilde{b} \quad - \text{równanie z zaburzoną prawą stroną.}
\end{aligned}$$

Pytanie: (tak jak poprzednio) *Jaki jest błąd względny otrzymanego wyniku ?*

Mamy

$$\begin{aligned}
x &= A^{-1}b \quad - \text{rozwiązanie dokładne,} \\
\tilde{x} &= A^{-1}\tilde{b} \quad - \text{rozwiązanie przybliżone.}
\end{aligned}$$

Teraz jest

$$\|x - \tilde{x}\| \leq \|A^{-1}b - A^{-1}\tilde{b}\| = \|A^{-1}(b - \tilde{b})\| \leq \|A^{-1}\| \|b - \tilde{b}\|.$$

Skąd wynika (wiemy, że $Ax = b$)

$$\|b - \tilde{b}\| \leq \|A^{-1}\| \frac{\|Bx\|}{\|b\|} \|b - \tilde{b}\| \leq \|A^{-1}\| \|A\| \|x\| \frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|}$$

Otrzymaliśmy w ten sposób następujące oszacowanie błędu względnego

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \underbrace{(\|A^{-1}\| \|A\|)}_{\kappa(A)} \frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|}$$

Liczba $\kappa(A)$ („condition number”) związana z macierzą nieosobliwą $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$\kappa(A) \stackrel{\text{def}}{=} \|A^{-1}\| \|A\|$$

odgrywa zasadniczą rolę w oszacowaniu błędu względnego rozwiązań układu równań przez błąd względny prawych stron

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|}.$$

□

PRZYKŁAD III (liczbowy)

Dla $\varepsilon > 0$ niech

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 + \varepsilon \\ 1 - \varepsilon & 1 \end{bmatrix}.$$

Mamy $\det(A) = \varepsilon^2$, więc macierz A jest nieosobliwa. Wtedy macierz odwrotna A^{-1} jest określona wzorem

$$A^{-1} = \frac{1}{\varepsilon^2} \begin{bmatrix} 1 & -1 - \varepsilon \\ -1 + \varepsilon & 1 \end{bmatrix}.$$

Dla normy macierzowej $\|\cdot\|_\infty$ mamy

$$\|A\|_\infty = 2 + \varepsilon \quad \text{ i } \quad \|A^{-1}\|_\infty = \frac{2 + \varepsilon}{\varepsilon^2}$$

skąd otrzymujemy, iż

$$\kappa(A) = \left(\frac{2 + \varepsilon}{\varepsilon^2} \right)^2 > \frac{4}{\varepsilon^2}.$$

Jeżeli przyjmiemy, że $\varepsilon = 0.01$ to otrzymamy $\kappa(A) > 40\,000$. Daje to pogląd o niebezpieczeństwach związanych z rozwiązywaniem układów równań.

□

.....
Jeżeli rozwiązujemy układ równań

$$Ax = b$$

numerycznie nie otrzymujemy dokładnego rozwiązania dokładnego x a jedynie przybliżone $\tilde{x}$. Oszacowanie błędów względnych jakie powstają jest dane przez

V-1.3 Twierdzenie

Jeżeli x jest rozwiązaniem dokładnym układu

$$Ax = b$$

a $\tilde{x}$ przybliżonym

$$A\tilde{a} \approx b,$$

to wtedy błąd względny przybliżonego rozwiązania $\tilde{x}$ spełnia

$$\frac{1}{\kappa(A)} \frac{\|b - A\tilde{x}\|}{\|b\|} \leq \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|b - A\tilde{x}\|}{\|b\|}, \quad (\text{V-1.1})$$

gdzie

$$\kappa(A) \stackrel{\text{def}}{=} \|A^{-1}\| \|A\|.$$

Dowód Dowodzimy prawej nierówności w (V-1.1). Mamy

$$\|x - \tilde{x}\| \|b\| = \|A^{-1}(b - A\tilde{x})\| \|Ax\| \leq \|A^{-1}\| \|b - A\tilde{x}\| \|A\| \|x\|$$

skąd otrzymujemy

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \underbrace{(\|A^{-1}\| \|A\|)}_{\kappa(A)} \frac{\|b - A\tilde{x}\|}{\|b\|}.$$

Teraz lewa strona (V-1.1). Zachodzi

$$\|b - A\tilde{x}\| \|x\| = \|A(x - \tilde{x})\| \|A^{-1}b\| \leq \|A\| \|x - \tilde{x}\| \|A^{-1}\| \|b\|$$

co daje

$$\frac{\|b - A\tilde{x}\|}{\|b\|} \leq \underbrace{(\|A^{-1}\| \|A\|)}_{\kappa(A)} \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|}.$$

□

W oszacowaniu błędu względnego numerycznego rozwiązania $\tilde{x}$ poza dokładnością wykonywanych obliczeń, istotną rolę pełni macierz A układu. Liczba $\kappa(A)$ określa „czułość” układu na błędy zaokrągleń. Macierze dla których liczba $\kappa(A)$ jest duża nazywamy źle uwarunkowane.

W przypadku analizy dokładności rozwiązania normę macierzową dobiera się w sposób umożliwiający przeprowadzenie obliczeń (lub oszacowań) na $\kappa(A)$. Przeważnie jest to norma spektralna.

PRZYKŁAD (wpływ skalowania macierzy na dokładność)

W przypadku teoretycznym rozwiązywania układu $Ax = b$, pomnożenie wiersza przez liczbę różną od zera nie wpływa na jego rozwiązanie. Dla numerycznego wyznaczenia rozwiązań jest inaczej. Zajmiemy się współczynnikiem

$$\kappa(A) = \|A\|_{\infty} \|A^{-1}\|_{\infty}$$

występującym w oszacowaniu błędów względnych. Niech

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \text{ wtedy } A^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \text{ oraz } \kappa(A) = 3 \cdot 3 = 9.$$

Mnożymy teraz pierwszy wiersz układu $Ax = b$ przez liczbę 10^{-4} aby otrzymać:

$$\hat{A} = \begin{bmatrix} 10^{-4} & 10^{-4} \\ 1 & 2 \end{bmatrix} \text{ wtedy } A^{-1} = \begin{bmatrix} 2 \cdot 10^4 & -1 \\ -10^4 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\text{oraz } \kappa(A) = 3 \cdot (2 \cdot 10^4 + 1) \approx 6 \cdot 10^4.$$

Zgodnie z tym co zostało udowodnione na wykładzie współczynnik $\kappa(A)$ – dobrego uwarunkowania macierzy, uczestniczył w oszacowaniu błędu względnego przybliżonego rozwiązania $\tilde{x}$

$$\frac{1}{\kappa(A)} \frac{\|b - A\tilde{x}\|}{\|b\|} \leq \frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|b - A\tilde{x}\|}{\|b\|}.$$

Z przykładu widać jak dużo zależy od wyboru normy macierzowej, jak i też od skalownia macierzy.

Literatura

Wrocław, dnia 7 grudnia 2010

(-) Krzysztof Tabisz
`tabisz@math.uni.wroc.pl`