Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Video na Youtube

Gaussova eliminační metoda

- jde o přímou metodu pro řešení lineárních algebraických soustav nebo pro výpočet inverzní matice
- budeme uvažovat pouze regulární matice $\mathbb{A} \in C^{n,n}$
- na základě této metody je odvozeno mnoho modifikací
- metoda se skládá ze dvou fází
  - **přímý chod** - spočívá v převedení úlohy $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ na úlohu $\mathbb{U}\vec{x} = \vec{d}$ se stejným řešením $\vec{x}$ jako původní úloha, s horní trojúhelníkovou maticí $\mathbb{U}$ a modifikovanou pravou stranou $\vec{d}$
  - **zpětný chod** - spočívá v řešení úlohy $\mathbb{U}\vec{x} = \vec{d}$ pomocí zpětné substituce

Gaussova eliminační metoda - přímý chod

Mějme regulární matici $\mathbb{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ a pravou stranu $\vec{b} \in \mathbb{C}^n$. Řešíme úlohu:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

- Předpokládáme, že první diagonální prvek a_{11} je nenulový. Nazveme ho **hlavním prvkem** nebo **pivotem** v prvním kroku.
- Podělíme první řádek soustavy číslem a_{11} a dostaneme:

Gaussova eliminační metoda - přímý chod

$$\begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix},$$

kde $u_{1j} = \frac{a_{1j}}{a_{11}}$ pro $j = 2, \ldots n$ a $d_1 = \frac{b_1}{a_{11}}$.

- Nyní odečteme jeho a_{i1} násobek od každého i-tého řádku pro $i = 2, \ldots n$. Tím jsme vynulovali první sloupeček od druhého do posledního řádku.

Gaussova eliminační metoda - přímý chod

$$
\begin{pmatrix}
1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\
0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
d_1 \\ b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)}
\end{pmatrix},
$$

kde

$$
\begin{aligned}
a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} - a_{i1} u_{1j}, \\
b_i^{(1)} &= b_i - a_{i1} d_1
\end{aligned}
$$

pro $i, j = 2, \ldots, n$.

Gaussova eliminační metoda - přímý chod

V dalším kroku použijeme stejný postup na soustavu

$$\begin{pmatrix} a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_2^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix},$$

která má o jedna menší rozměry.

Gaussova eliminační metoda - přímý chod

Po n krocích dojdeme k soustavě

$$\begin{pmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & 1 & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & 1 & u_{n-1n} \\ & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix},$$

kde v k-tém kroku počítáme pro $i, j = k+1, \ldots, n$

$$\begin{aligned} u_{kj} &= \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad d_k = \frac{b_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \\ a_{ij}^{(k)} &= a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} u_{kj}, \\ b_i^{(k)} &= b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} d_k, \end{aligned}$$

a definujeme $a_{ij}^{(0)} = a_{ij}$ a $b_i^{(0)} = b_i$.

Gaussova eliminační metoda - přímý chod

- pozor, v kódu indexujeme od 0 do $n - 1$

```
for( int k = 0; k < n; k++ )
{
   /****
    * Deleni k-teho radku pivotem
    */
   b[ k ] = b[ k ] / A[ k ][ k ];
   for( int i = n-1; i >= k; i-- )
   {
      A[ k ][ i ] = A[ k ][ i ] / A[ k ][ k ];
   }

   /****
    * Eliminace prvku pod pivotem
    */
   for( int j = k+1; j < n; j++ )
   {
      /****
       * Odecitani k-teho radku od j-teho
       */
      b[ j ] = b[ j ] - A[ j ][ k ] * b[ k ];
      for( int i = k+1; i < n; i++ )
      {
         A[ j ][ i ] =
            A[ j ][ i ] - A[ j ][ k ] * A[ k ][ i ];
      }
      A[ j ][ k ] = 0.0;
   }
}
```

Tomáš Oberhuber

GEM

GEM - numerická analýza

Modifikovaná GEM

Otázky

Gaussova eliminační metoda - zpětný chod

- nyní řešíme soustavu s horní trojúhelníkovou maticí a pravou stranou $\vec{d}$
- z poslední rovnice je snadno vidět, že

$$x_n = d_n$$

- z předposlední rovnice a ze znalosti x_n snadno dostaneme

$$x_{n-1} = d_{n-1} - u_{n-1,n} x_n$$

- obecně pak je pro $k = n, \dots 1$

$$x_k = d_k - \sum_{i=k+1}^{n} u_{ki} x_i.$$

```
for( int k = n-1; k >= 0; k-- )
{
   x[ k ] = b[ k ];
   for( int j = n-1; j > k; j-- )
      x[ k ] = x[ k ] - A[ k ][ j ] * x[ j ];
}
```

Gaussova eliminační metoda - složitost

Výpočetní složitost GEMu

- dále si ukážeme, že počet operací nutných k provedení GEM je řádově roven n^3
- budeme analyzovat výpočetní složitost algoritmu GEMu

Gaussova eliminační metoda - složitost

```
3      /****
4       * Deleni k-teho radku pivotem
5       */
6      b[ k ] = b[ k ] / A[ k ][ k ];
7      for( int i = n-1; i >= k; i-- )
8      {
9         A[ k ][ i ] = A[ k ][ i ] / A[ k ][ k ];
10     }
```

- na řádku 6 provádíme jedno dělení a jedno přiřazení $\Rightarrow$ 2 operace
- na řádku 9 provádíme také jedno dělení a jedno přiřazení $\Rightarrow$ 2 operace
- řádek 9 je vnořen do cyklu, ve kterém se vždy provádí jedno porovnání (`i >= k`) a jedna dekrementace (`i--`) $\Rightarrow$ 2 operace
- cyklus se provede `n-k`-krát $\Rightarrow$ $4(n-k)$ operací
- přičteme 2 operace za řádek 6 a 2 operace za přiřazení `i=n-1` z inicializace proměnné `i` v cyklu na řádku 7
- celkem máme $4+4(n-k)$ operací

Gaussova eliminační metoda - složitost přímého chodu

```
12    /* ***
13     * Eliminace prvku pod pivotem
14     */
15    for( int j = k+1; j < n; j++ )
16    {
17       /* ***
18        * Odecitani k-teho radku od j-teho
19        */
20       b[ j ] = b[ j ] - A[ j ][ k ] * b[ k ];
21       for( int i = k+1; i < n; i++ )
22       {
23          A[ j ][ i ] =
24             A[ j ][ i ] - A[ j ][ k ] * A[ k ][ i ];
25       }
26       A[ j ][ k ] = 0.0;
27    }
```

Obdobně dostáváme:

- 3 operace na řádcích 23 a 24
- 2 operace v každém cyklu smyčky na řádku 21
- 2 operace v inicializaci for cyklu na řádku 21 (`i=k+1`)
- celkem pro smyčku na řádcích 21–25, která se opakuje $(n-k-1)$-krát pak $5(n-k-1)+2$ operací
- na řádku 20 provádíme 3 operace
- na řádku 26 provádíme 1 přiřazení
- uvnitř smyčky začínající na řádku 15, provádíme tedy $5(n-k-1)+6$
- přidáme ještě 2 operace za porovnání a inkrementace ve smyčce $\Rightarrow 5(n-k-1)+8$
- smyčka se provede $(n-k-1)$-krát
- celkem tedy (včetně inicializace smyčky)

$$2+(n-k-1)\left[5(n-k-1)+8\right]=2+5\left[(n-k-1)^2+8(n-k-1)\right]$$

Tomáš Oberhuber

GEM

GEM - numerická analýza

Modifikovaná GEM

Otázky

Gaussova eliminační metoda - složitost přímého chodu

- přičteme $4 + 4(n-k)$ operací za řádky 3–10
- vnitřek smyčky začínající na řádku 1, tedy obsahuje

$$\underbrace{4 + 4(n-k)}_{r.3-10} + \underbrace{2 + 5(n-k-1)^2 + 40(n-k-1)}_{r.12-27} + \underbrace{2}_{r.15;j=k+1} =$$

$$= 5k^2 - 2k(5n+17) + n(5n+34) - 27$$

operací

- to vše je uvnitř smyčky iterující pro $k = 1, \ldots n$
- počítáme tedy sumu

$$\sum_{k=1}^{n} \left[5k^2 - k(10n+19) + n(5n+19) - 27 + \underbrace{2}_{k<n;k++} \right] + \underbrace{1}_{k=0} \quad (1)$$

Gaussova eliminační metoda - složitost přímého chodu

- využijeme zde znalosti z prvního ročníku pro sčítání sumy

$$\sum_{k=1}^{n} k^2 = \frac{1}{6} n(n+1)(2n+1)$$

- celkový výsledek je

$$\sum_{k=1}^{n} \left[5k^2 - k(10n+19) + n(5n+19) - 25 \right] + 1 =$$

$$\frac{5}{3} n^3 + \frac{105}{3} n^2 - \frac{101}{3} n + 1 \approx n^3$$

Gaussova eliminační metoda - složitost přímého chodu

- při asymptotické analýze nás zajímá pouze asymptotické chování výsledného vztahu pro $n \to \infty$
- zajímá nás proto pouze nejrychleji rostoucí člen celého výsledku, tj. n^3
- ten vznikl ze sumy $\sum_{k=1}^{n} k^2$ v sumě (1)
- ostatní členy této sumy jsme proto klidně mohli zanedbat
- stejně tak není důležitá konstanta 5 před k^2 ve stejné sumě
- proto také nemusíme odvozovat přesný počet operací, jen jejich řádový počet
  - na CPU navíc stejně zpracování každé operace trvá různě dlouho, takže přesný výraz pro časovou náročnost není možné získat

Gaussova eliminační metoda - složitost přímého chodu

- zjednodušeně tak lze postupovat takto:
- v přímém chodu postupně v n krocích eliminujeme nenulové prvky pod diagonálou
- v k-tém kroku této úpravy nejprve dělíme k-tý řádek pivotem tj. **řádově** $n-k$ operací
- následně musíme v každém řádku s indexem $k+1,\ldots,n$ upravit prvky se sloupcovými indexy $k,\ldots,n$
- to je celkem **řádově** $(n-k+1)^2$ operací
- celý přímý chod tak **řádově** zabírá ($n-k$ můžeme zanedbat, je řádově menší)

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

operací.

Gaussova eliminační metoda - složitost zpětné substituce

- zpětný chod budeme analyzovat již stručněji
- ve zpětném chodu celkem v n krocích postupně napočítáváme hodnoty řešení x_n
- v každém kroku k od hodnoty d_{n-k+1} odečítáme násobky již napočítaných složek řešení vektoru $\vec{x}$, kterých je $n-k+1$
- celková složitost je

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

Gaussova eliminační metoda - složitost zpětné substituce

- složitost n^3 je velmi nepříjemná
- GEM je vhodná pro malé matice, ale pro velké je neúnosně pomalá

Gaussova eliminační metoda - výpočetní příklady

Příklady lze nejsnáze zkoušet v systému Linux. Pod Windows lze provozovat Linux virtuálně pomocí např.

- VMware ...
  - `www.vmware.com/go/tryplayerpro-win-64`
- ... nebo VirtualBox
  - `www.virtualbox.org`
- následně lze nainstalovat např. Ubuntu Linux
  - `www.ubuntu.com/download/desktop`
- zdrojové kódy s numerickými metodami lze získat na adrese
  - `gitlab.com/oberhuber.tomas/fjfi-num-src`
  - tlačítkem *Download* vedle *History* a *Find file*

```
# Rozbalit archiv se zdrojovymi kody
tar xvf fjfi-num-src-master-<ID>.tar.gz
# Presunout se do vytvoreneho adresare
cd fjfi-num-src-master-<ID>
#Prelozit zdrojove kody
make
#Pripadne je mozne je nainstalovat do ${HOME}/.local/bin
make install
```

Gaussova eliminační metoda - výpočetní příklady

- GEM metoda je implementovaná v programu `bin/gem-solver`
- má tyto parametry
  - `--input-file` matice.mtx
    - soubor ve formátu `mtx` se vstupní maticí
    - pravá strana se napočítá tak, aby řešením byl vektor ze samých jedniček
  - `--pivoting yes/no`
    - zapíná pivoting pro vyšší stabilitu (viz další část přednášky)
  - `--verbose n`
    - nastavuje úroveň vypisovaných informací v průběhu výpočtu

Gaussova eliminační metoda - výpočetní příklady

Example 1

- v adresáři `data` je několik malých vzorových matic
- vyzkoušejte následující výpočty

```
bin/gem-solver --input-file data/matrix-1.mtx --verbose 0
bin/gem-solver --input-file data/matrix-1.mtx --verbose 1
bin/gem-solver --input-file data/matrix-1.mtx --verbose 2
```

Gaussova eliminační metoda - výpočetní příklady

Example 2

- na stránkách
  - `http://math.nist.gov/MatrixMarket/`
  - `http://sparse.tamu.edu`
- najděte jiné matice a ozkoušejte rychlost a stabilitu GEM.

Například:

```
bin/gem-solver --input-file bcsstk01.mtx
bin/gem-solver --input-file bcsstk06.mtx
bin/gem-solver --input-file bcsstk11.mtx
```

Pravidla o elementárních úpravách

Definition 3

Elementární úpravou provedenou v obdélníkové matici $\mathbb{A} \in \mathbb{C}^{n,n}$ nazveme:

- násobení všech prvků zvoleného *i*-tého řádku resp. sloupce číslem α
- přičtení α-násobku prvků zvoleného *j*-tého řádku resp. sloupce k prvkům *i*-tého řádku resp. sloupce

Pravidla o elementárních úpravách

Remark 4

Násobení i-tého řádku resp. sloupce matice $\mathbb{A}$ číslem α je ekvivalentní násobení matice $\mathbb{A}$ zleva resp. zprava maticí

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & & & & & \\
0 & \ddots & \ddots & & & & \\
 & \ddots & 1 & \ddots & & & \\
 & & 0 & \alpha & 0 & & \\
 & & & \ddots & 1 & \ddots & \\
 & & & & \ddots & \ddots & 0 \\
 & & & & & 0 & 1
\end{pmatrix},
$$

s číslem α na i-tém řádku.

Pravidla o elementárních úpravách

Remark 5

Přičtení α-násobku prvků zvoleného j-tého řádku resp. sloupce matice $\mathbb{A}$ k jejímu i-tému řádku resp. sloupci je ekvivalentní násobení matice $\mathbb{A}$ zleva resp. zprava maticí

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & & & & & \\
0 & \ddots & \ddots & & & & \\
 & \ddots & 1 & \ddots & & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\
 & & \alpha & \ddots & 1 & \ddots & \\
 & & & & \ddots & \ddots & 0 \\
 & & & & & 0 & 1
\end{pmatrix},
$$

tj. s maticí s jedničkami na diagonále a číslem α na i-tém řádku a j-tém sloupci.

Pravidla o elementárních úpravách

Remark 6

Provedeme-li na řádky resp. sloupce obdélníkové matice $\mathbb{A}$ *konečný počet elementárních úprav, je výsledek stejný, jako když matici* $\mathbb{A}$ *vynásobíme zleva resp. zprava maticí, která vznikne z matice* $\mathbb{I}$ *stejnými úpravami.*

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- nyní si GEM popíšeme v maticovém tvaru, který nám pomůže odvodit, za jakých podmínek lze tuto metodu použít
- pro zjednodušení zápisu si zavedeme rozšířenou matici soustavy

$$\mathbb{P} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- na konci prvního kroku přímého chodu má rozšířená matice soustavy tvar

$$\mathbb{P}^{(1)} = \left(\begin{array}{cccc|c} 1 & u_{12} & \dots & u_{1n} & d_1 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} & b_2^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} & b_n^{(1)} \end{array} \right)$$

- toho bylo dosaženo vhodnými elementárními úpravami
- víme, že každou tuto úpravou lze popsat pomocí vhodné matice

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- vydělení prvního řádku matice $\mathbb{P}$ číslem a_{11} je ekvivalentní vynásobení matice $\mathbb{P}$ zleva maticí

$$\mathbb{M}_1^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- přičtení $-a_{21}$ násobku prvního řádku k druhému řádku je ekvivalentní vynásobení matice $\mathbb{P}$ zleva maticí

$$\mathbb{M}_2^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ -a_{21} & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{pmatrix}$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- přičtení $-a_{k1}$ násobku prvního řádku ke k-tému řádku je ekvivalentní vynásobení matice $\mathbb{P}$ zleva maticí

$$\mathbb{M}_k^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ -a_{k1} & & 1 & & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- dohromady pak je

$$\mathbb{M}^{(1)} = \mathbb{M}_n^{(1)} \dots \mathbb{M}_1^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & & \\ & & \ddots & \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & & & 1 \end{pmatrix}$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- obecně před zahájením k-tého kroku máme matici $\mathbb{P}^{(k-1)}$ tvaru

$$\left(\begin{array}{ccccccc|c}
1 & u_{12} & \dots & \dots & u_{1k} & \dots & u_{1n} & d_1 \\
 & 1 & \dots & \dots & u_{2k} & \dots & u_{2n} & d_2 \\
 & & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & 1 & u_{k-1,k} & \dots & u_{k-1,n} & d_{k-1} \\
 & & & & a_{kk}^{(k-1)} & \dots & a_{kn}^{(k-1)} & b_k^{(k-1)} \\
 & & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & & a_{nk}^{(k-1)} & \dots & a_{nn}^{(k-1)} & b_n^{(k-1)}
\end{array}\right)$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- na konci k-tého kroku máme matici $\mathbb{P}^{(k)}$ tvaru

$$\left(\begin{array}{cccccccc|c}
1 & u_{12} & \dots & \dots & u_{1k} & u_{1,k+1} & \dots & u_{1n} & d_1 \\
 & 1 & \dots & \dots & u_{2k} & u_{2,k+1} & \dots & u_{2n} & d_2 \\
 & & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & 1 & u_{k-1,k} & u_{k-1,k+1} & \dots & u_{k-1,n} & d_{k-1} \\
 & & & & 1 & u_{k,k+1} & \dots & u_{kn} & d_k \\
 & & & & & a^{(k)}_{k+1,k+1} & \dots & a^{(k)}_{k+1,n} & b^{(k)}_{k+1} \\
 & & & & & \vdots & & \vdots & \vdots \\
 & & & & & a^{(k)}_{n,k+1} & \dots & a^{(k)}_{nn} & b^{(k)}_n
\end{array}\right)$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- toho jsme dosáhli násobením matice $\mathbb{P}^{(k-1)}$ zleva maticí $\mathbb{M}^{(k)}$ tvaru

$$
\begin{pmatrix}
1 & & & & & & \\
& \ddots & & & & & \\
& & 1 & & & & \\
& & & \frac{1}{a_{kk}^{(k-1)}} & & & \\
& & & -\frac{a_{k+1,k}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & 1 & & \\
& & & \vdots & & \ddots & \\
& & & -\frac{a_{nk}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} & & & 1
\end{pmatrix}
$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- na konci přímého chodu máme matici $\mathbb{P}^{(n)}$ tvaru

$$\left(\begin{array}{ccccc|c} 1 & u_{12} & \dots & \dots & u_{1n} & d_1 \\ & 1 & \dots & \dots & u_{2n} & d_2 \\ & & \ddots & & \vdots & \vdots \\ & & & 1 & u_{n-1,n} & d_{n-1} \\ & & & & 1 & d_n \end{array}\right)$$

- přitom platí

$$\mathbb{P}^{(n)} = \mathbb{M}^{(n)}\mathbb{M}^{(n-1)}\dots\mathbb{M}^{(1)}\mathbb{P} = \mathbb{M}\mathbb{P},$$

kde jsme definovali

$$\mathbb{M} = \mathbb{M}^{(n)}\mathbb{M}^{(n-1)}\dots\mathbb{M}^{(1)}$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- v blokovém zápisu pak vidíme, že

$$\mathbb{MP} = \left(\mathbb{MA}, \mathbb{M}\vec{b}\right)$$

- pokud zavedeme značení

$$\mathbb{P}^{(n)} = \left(\mathbb{U}, \vec{d}\right),$$

pak dostáváme

$$\mathbb{U} = \mathbb{MA} \Rightarrow \mathbb{A} = \mathbb{M}^{-1}\mathbb{U}$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- jelikož $\mathbb{M}$ je dolní trojúhelníková, víme, že i $\mathbb{M}^{-1}$ je dolní trojúhelníková a její diagonální prvky jsou převrácené hodnoty diagonálních prvků matice $\mathbb{M}$
- diagonálu matice $\mathbb{M}^{-1}$ tedy tvoří prvky

$$\left\{ a_{11}, a_{22}^{(1)} \dots a_{nn}^{n-1} \right\}$$

- definujme matici

$$\mathbb{D} = \mathrm{diag}\left(a_{11}, a_{22}^{(1)} \dots a_{nn}^{n-1} \right),$$

pak lze psát

$$\mathbb{A} = \left(\mathbb{M}^{-1}\mathbb{D}^{-1} \right) \mathbb{D}\mathbb{U},$$

kde matice $\mathbb{M}^{-1}\mathbb{D}^{-1}$ má jedničky na diagonále.

- dostali jsme tak rozklad tvaru

$$\mathbb{A} = \mathbb{L}\mathbb{D}\mathbb{R}$$

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

- víme, že rozklad $\mathbb{A} = \mathbb{LDR}$ existuje jen pro silně regulární matice
- to vyžaduje, aby všechny "horní levé" čtvercové "podmatice" byly regulární
- to bude tehdy, když během výpočtu GEM nenarazíme na nulového pivota
- provedeme přesný důkaz

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

Definition 7

Říkáme, že GEM lze provést, právě tehdy, když žádný z pivotů není nulový.

Theorem 8

Základní GEM lze provést právě tehdy, když matice lineární soustavy $\mathbb{A}$ je silně regulární.

Důkaz.

Video na Youtube ☐

Gaussova eliminační metoda - numerická analýza

Co když ale matice není silně regulární, ale přitom je regulární? Víme, že řešení soustavy existuje a rádi bychom ho nějak získali.

Modifikovaná Gaussova eliminační metoda

- pokud matice soustavy není silně regulární, nastane situace, že se objeví nulový pivot $a_{kk}^{(k-1)}$
- řešením je zvolit za vedoucí prvek některý jiný nenulový z matice
$$\begin{pmatrix} a_{kk}^{(k-1)} & \dots & a_{kn^{(k-1)}} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{nk}^{(k-1)} & \dots & a_{nn^{(k-1)}} \end{pmatrix}$$
- jelikož matice $\mathbb{A}$ je regulární, nemůže být uvedená submatice nulová
- pro úvahu nad tím, jak vybrat nejlepšího pivota se podívejme na následující příklad

Modifikovaná Gaussova eliminační metoda

Example 9

Co způsobí malý pivot v aritmetice s konečnou přesností $\mathbb{F}(10, 2, -5, 5)$? Mějme následující soustavu a provádějme základní GEM.

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 10^{-5} & 1 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & 3 \end{array}\right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 10^5 & 2\cdot 10^5 & 1\cdot 10^5 \\ 3 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & 3 \end{array}\right) \rightarrow$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 10^5 & 2\cdot 10^5 & 1\cdot 10^5 \\ 0 & 2-3\cdot 10^5 & 1-6\cdot 10^5 & 1-3\cdot 10^5 \\ 0 & 3-2\cdot 10^5 & 3-4\cdot 10^5 & 3-2\cdot 10^5 \end{array}\right) \rightarrow$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 10^5 & 2\cdot 10^5 & 1\cdot 10^5 \\ 0 & -3\cdot 10^5 & -6\cdot 10^5 & -3\cdot 10^5 \\ 0 & -2\cdot 10^5 & -4\cdot 10^5 & -2\cdot 10^5 \end{array}\right)$$

- vidíme, že poslední dva řádky jsou lineárně závislé
- došlo k tomu, že díky dělení malým pivotem vznikl extrémně velký řádek, který pak přebil všechny následující řádky

Modifikovaná Gaussova eliminační metoda

Example 10

Naopak velký pivot v aritmetice s konečnou přesností $\mathbb{F}(10, 2, -5, 5)$ se bude chovat následovně

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 10^5 & 1 & 2 & 1 \\ 3 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & 3 \end{array}\right) \rightarrow \left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 10^{-5} & 2 \cdot 10^{-5} & 1 \cdot 10^{-5} \\ 3 & 2 & 1 & 1 \\ 2 & 3 & 3 & 3 \end{array}\right) \rightarrow$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 10^{-5} & 2 \cdot 10^{-5} & 1 \cdot 10^{-5} \\ 0 & 2 - 3 \cdot 10^{-5} & 1 - 6 \cdot 10^{-5} & 1 - 3 \cdot 10^{-5} \\ 0 & 3 - 2 \cdot 10^{-5} & 3 - 4 \cdot 10^{-5} & 3 - 2 \cdot 10^{-5} \end{array}\right) \rightarrow$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 10^{-5} & 2 \cdot 10^{-5} & 1 \cdot 10^{-5} \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 3 & 3 \end{array}\right)$$

- po vydělení jsme dostali hodně velký řádek, který při následných úpravách zbytek matice ovlivnil jen málo
- došlo také k výpočetním chybám, ale takovým, které příliš neovlivní následující výpočet

Modifikovaná Gaussova eliminační metoda

- modifikovaná GEM tedy spočívá ve výběru vhodného pivota
- z předchozích úvah plyne, že je nejlepší vybírat za pivota velké prvky (v absolutní hodnotě), např. největší prvek z matice

$$\begin{pmatrix} a_{kk}^{(k-1)} & \dots & a_{kn^{(k-1)}} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{nk}^{(k-1)} & \dots & a_{nn^{(k-1)}} \end{pmatrix}$$

- pokud se nachází v i-tém řádku a j-tém sloupci, provedeme prohození i-tého a k-tého sloupce a j-tého a k-tého řádku a dál pokračujeme jako u běžné GEM
- nevýhoda tohoto postupu je, že musíme vždy prohledávat k^2 prvků a prohazovat i řádky
- proto často vybíráme v absolutní hodnotě největší prvek z k-tého sloupce

Modifikovaná Gaussova eliminační metoda

- v obou případech získáme nakonec permutaci řádků nebo i sloupců, která převede původně pouze regulární matici na silně regulární

Otázky

- **odvození GEM včetně algoritmu**
- **pro jaké matice lze použít GEM**
- **vysvětlit modifikovanou GEM**