Wstęp do metod numerycznych

Eliminacja Gaussa

Równania macierzowe

P. F. Góra

http://th-www.if.uj.edu.pl/zfs/gora/

2015

Co można zrobić z układem równań

... tak, aby jego rozwiązania się nie zmieniły?

Rozważam układ równań (przykład 3×3 dla oszczędności miejsca):

$$\left\{ \begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & a_{13}x_3 & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & = & b_2 \\ a_{31}x_1 & + & a_{32}x_2 & + & a_{33}x_3 & = & b_3 \end{array} \right. \tag{1}$$

1. Równania można zapisać w innej kolejności:

$$\left\{ \begin{array}{ccccccc} a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & = & b_2 \\ a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & a_{13}x_3 & = & b_1 \\ a_{31}x_1 & + & a_{32}x_2 & + & a_{33}x_3 & = & b_3 \end{array} \right. \tag{2}$$

Odpowiada to **permutacji wierszy macierzy układu równań, z jednoczesną permutacją kolumny wyrazów wolnych**.

2. Równania można dodać stronami, po pomnożeniu przez dowolną stałą różną od zera:

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcr} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & a_{13}x_3 & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & = & b_2 \\ (z\cdot a_{11}+a_{31})x_1 & + & (z\cdot a_{12}+a_{32})x_2 & + & (z\cdot a_{13}+a_{33})x_3 & = & z\cdot b_1+b_3 \end{array}\right. \tag{3}$$

Odpowiada to **zastąpieniu jednego wiersza macierzy układu równań przez dowolną kombinację liniową tego wiersza z innymi, z jednoczesną analogiczną operacją na kolumnie wyrazów wolnych**.

3. We wszystkich równaniach można przestawić kolejność, w jakiej pojawiają się zmienne:

$$\left\{ \begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{13}x_3 & + & a_{12}x_2 & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{23}x_3 & + & a_{22}x_2 & = & b_2 \\ a_{31}x_1 & + & a_{33}x_3 & + & a_{32}x_2 & = & b_3 \end{array} \right. \tag{4}$$

Odpowiada to **permutacji *kolumn* macierzy układu równań, z jednoczesną permutacją kolumny niewiadomych**.

Eliminacja Gaussa

Rozpatrzmy jeszcze raz układ równań

$$\left\{\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & a_{13}x_3 & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & = & b_2 \\ a_{31}x_1 & + & a_{32}x_2 & + & a_{33}x_3 & = & b_3 \end{array}\right. \tag{5}$$

Podzielmy pierwsze równanie stronami przez a_{11}

$$\left\{\begin{array}{ccccccc} x_1 & + & \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 & + & \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 & = & \frac{b_1}{a_{11}} \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & = & b_2 \\ a_{31}x_1 & + & a_{32}x_2 & + & a_{33}x_3 & = & b_3 \end{array}\right. \tag{6}$$

Teraz mnożymy pierwsze z równań (6) przez a_{21} i odejmijmy stronami od drugiego, a następnie mnożymy pierwsze z równań (6) przez a_{31} i odejmijmy stronami od trzeciego. Otrzymujemy

$$\left\{\begin{array}{lcrcrcl} x_1 & + & \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 & + & \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 & = & \frac{b_1}{a_{11}} \\ & & \left(a_{22}-\frac{a_{21}a_{12}}{a_{11}}\right)x_2 & + & \left(a_{23}-\frac{a_{21}a_{13}}{a_{11}}\right)x_3 & = & b_2-\frac{a_{21}}{a_{11}}b_1 \\ & & \left(a_{32}-\frac{a_{31}a_{12}}{a_{11}}\right)x_2 & + & \left(a_{33}-\frac{a_{31}a_{13}}{a_{11}}\right)x_3 & = & b_3-\frac{a_{31}}{a_{11}}b_1 \end{array}\right. \tag{7a}$$

Przepiszmy to w postaci (tylko zmiana oznaczeń!)

$$\left\{\begin{array}{lcrcrcl} x_1 & + & a'_{12}x_2 & + & a'_{13}x_3 & = & b'_1 \\ & & a'_{22}x_2 & + & a'_{23}x_3 & = & b'_2 \\ & & a'_{32}x_2 & + & a'_{33}x_3 & = & b'_3 \end{array}\right. \tag{7b}$$

W układzie równań (7b) pierwsza zmienna, x_1, występuje wyłącznie w pierwszym równaniu. Tego równania już nie przekształcamy, natomiast z pozostałymi równaniami postępujemy analogicznie: dzielimy drugie stronami przez a'_{22} i odpowiednio mnożąc, odejmujemy od trzeciego. Otrzymujemy

$$\left\{\begin{array}{rcrcrcl} x_1 & + & a'_{12}x_2 & + & a'_{13}x_3 & = & b'_1 \\ & & x_2 & + & a''_{23}x_3 & = & b''_2 \\ & & & & a''_{33}x_3 & = & b''_3 \end{array}\right. \tag{8}$$

Teraz pierwsza zmienna występuje wyłącznie w pierwszym równaniu, druga — w pierwszym i w drugim. Gdyby równań było więcej, moglibyśmy to postępowanie kontynuować.

Ostatecznie otrzymalibyśmy równanie postaci

$$\left\{ \begin{array}{ccccccccccc} x_1 & + & \bullet x_2 & + & \bullet x_3 & + & \dots & + & \bullet x_N & = & \tilde{b}_1 \\ & & x_2 & + & \bullet x_3 & + & \dots & + & \bullet x_N & = & \tilde{b}_2 \\ & & & & x_3 & + & \dots & + & \bullet x_N & = & \tilde{b}_3 \\ & & & & & & \dots & & \dots & & \dots \\ & & & & & & & & x_N & = & \tilde{b}_N \end{array} \right. \tag{9}$$

gdzie symbole $\bullet$ oznaczają *jakieś* współczynniki, dające się wyliczyć z pierwotnych współczynników równania, $\tilde{b}_i$ są przekształconymi w toku całej procedury wyrazami wolnymi.

Równanie w postaci (9) nazywamy układem równań *z macierzą trójkątną górną*. Algorytm prowadzący od (5) do (9) nazywamy *eliminacją Gaussa*.

Dygresja: Złożoność obliczeniowa

Niech N oznacza liczbę danych wejściowych pewnego algorytmu. Niech $\mathcal{M}(N)$ oznacza liczbę operacji, jaką algorytm ten wykonuje dla N danych. Mówimy, że algorytm ma złożoność obliczeniową $O\left(\mathcal{P}(N)\right)$ jeżeli

$$\exists N_0 \in \mathbb{N},\ A_1, A_2 > 0\ \forall N > N_0 \colon\ A_1 \cdot \mathcal{P}(N) \leqslant \mathcal{M}(N) \leqslant A_2 \cdot \mathcal{P}(N) \tag{10}$$

Złożoność obliczeniowa eliminacji Gaussa

Aby usunąć zmienną x_1 z jednego wiersza, należy wykonać $O(N)$ operacji. Ponieważ zmienną x_1 musimy usunąć z $N-1$ wierszy, musimy łącznie wykonać $O(N^2)$ operacji. Ponieważ musimy to samo zrobić ze zmiennymi $x_2, x_3, \ldots$, ostatecznie musimy wykonać $O(N^3)$ operacji.

Złożoność obliczeniowa eliminacji Gaussa wynosi $O(N^3)$.

Backsubstitution

Rozpatrzmy układ równań w postaci (9). Ostatnie równanie jest rozwiązane ze względu na x_N. Podstawiamy to rozwiązanie do wszystkich poprzednich równań. Teraz drugie od dołu równanie ma tylko jedną nieznaną zmienną — x_{N-1}, a coś takiego umiemy rozwiązać. Podstawiamy to rozwiązanie do równania trzeciego od dołu i do poprzednich. Teraz trzecie od dołu równanie zawiera tylko jedną zmienną, x_{N-2}. Rozwiązujemy, podstawiamy do poprzednich i tak dalej...

Ponieważ wyeliminowanie jednej zmiennej wymaga $O(N)$ operacji, a musimy wyeliminować N zmiennych, cały koszt rozwiązania układu z macierzą trójkątną górną za pomocą algorytmu *backsubstitution* wynosi $O(N^2)$. Jest to *niewiele* w porównaniu z kosztem eliminacji Gaussa.

Całkowity koszt rozwiązania układu N równań liniowych za pomocą eliminacji Gaussa z następującym *backsubstitution* wynosi $O(N^3)$.

Czy coś może pójść źle?

Cały algorytm zawali się, **jeżeli w którymś momencie trzeba będzie wykonać dzielenie przez zero**

$$a_{11} = 0 \text{ lub } a'_{22} = 0, \text{ lub } a''_{33} = 0 \text{ itd.}$$

Przykład

Układu równań

$$
\left\{
\begin{array}{rcrcrcl}
 & & y & + & z & = & 1 \\
x & + & y & + & z & = & 2 \\
2x & & & - & z & = & 0
\end{array}
\right.
\tag{11}
$$

nie da się doprowadzić do postaci trójkątnej górnej za pomocą eliminacji Gaussa. Jeśli jednak przestawimy pierwszy wiersz z drugim lub z trzecim, eliminacja Gaussa powiedzie się.

Ze względów numerycznych staramy się także unikać dzielenia przez liczby bardzo małe co do wartości bezwzględnej. *Formalnie*, w arytmetyce dokładnej, jest to wykonalne, ale *w praktyce* może to doprowadzić do bardzo znacznej utraty dokładnosci, tak, że ostateczny wynik będzie numerycznie bezwartościowy.

Wybór elementu podstawowego

Przypuśćmy, że na pewnym etapie eliminacji Gaussa mamy układ równań

$$
\left\{
\begin{array}{ccccccccccc}
x_1 & + & \dots & \dots & \dots & & \dots & & \dots & = & b_1 \\
 & & x_2 & + & \dots & \dots & & \dots & \dots & = & b_2 \\
 & & & & \dots & \dots & & \dots & \dots & & \dots \\
 & & & & & a_{kk}x_k & + & a_{k,k+1}x_{k+1} & + \; \dots & = & b_k \\
 & & & & & a_{k+1,k}x_k & + & a_{k+1,k+1}x_{k+1} & + \; \dots & = & b_{k+1} \\
 & & & & & \dots & & \dots & \dots & & \dots \\
 & & & & & a_{Nk}x_k & + & a_{N,k+1}x_{k+1} & + \; \dots & = & b_N
\end{array}
\right.
\tag{12}
$$

"Powinniśmy" teraz dzielić przez a_{kk}. Zamiast tego wśród współczynników $a_{kk}, a_{k+1,k}, a_{k+2,k}, \dots, a_{Nk}$ wyszukujemy największy co do modułu, permutujemy wiersze tak, aby ten największy co do modułu znalazł się w pozycji diagonalnej i dzielimy przez niego. Współczynnik wypromowany do pozycji diagonalnej nazywa się elementem podstawowym (ang. pivot). Ten krok algorytmu nazywa się *częściowym wyborem elementu podstawowego*. Dalej postępujemy jak poprzednio.

Koszt wyszukania jednego elementu podstawowego wynosi $O(N)$. Jeżeli robimy to w każdym kroku, całkowity koszt jest rzędu $O(N^2)$, a więc jest mały w porównaniu ze złożonością obliczeniową samej eliminacji Gaussa. Wynika z tego, iż częściowego wyboru elementu podstawowego należy zawsze dokonywać, gdyż nie zwiększa to znacznie kosztu całej procedury, może natomiast zapewnić numeryczną stabilność algorytmu.

Zamiast szukać elementu podstawowego wyłącznie w jednej kolumnie, można szukać największego co do modułu współczynnika wśród wszystkich $a_{i,j}, k \leqslant i, j \leqslant N$. Po znalezieniu, należy tak spermutować wiersze i kolumny układu równań, aby element podstawowy znalazł się w pozycji diagonalnej. Nazywa się to *pełnym wyborem elementu podstawowego*. Zauważmy, że koszt numeryczny wynosi $O(N^3)$, a więc staje się porównywalny z kosztem całej eliminacji Gaussa, ponadto zaś permutacja kolumn wymaga późniejszego odwikłania permutacji elementów rozwiązania, co jest kłopotliwe. Pełny wybór elementu podstawowego zapewnia większą stabilność numeryczną, niż wybór częściowy, ale w praktyce jest rzadko używany, ze wskazanych wyżej powodów.

Do skutecznego przeprowadzenia eliminacji Gaussa potrzebna jest znajomość kolumny wyrazów wolnych, gdyż wyrazy wolne także są przekształcane i permutowane w czasie eliminacji.

Uwagi o eliminacji Gaussa

Przypuśćmy, że mamy rozwiązać kilka układów równań z tą samą lewą stroną, a różnymi wyrazami wolnymi:

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{b}^{(i)}\,, \quad i = 1, 2, \dots, M \tag{13}$$

gdzie $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N\times N}$, $\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{b}^{(i)} \in \mathbb{R}^{N}$. Eliminacja Gaussa (z wyborem elementu podstawowego!) jest efektywna, jeżeli z góry znamy *wszystkie* prawe strony $\mathbf{b}^{(1)}, \mathbf{b}^{(2)}, \dots, \mathbf{b}^{(M)}$, gdyż w tym wypadku przeprowadzając eliminację Gaussa, możemy przekształcać wszystkie prawe strony *jednocześnie*. Całkowity koszt rozwiązania (13) wynosi wówczas $O(N^3) + O(MN^2)$.

Jeżeli jednak wszystkie prawe strony nie są z góry znane — co jest sytuacją typową w obliczeniach iteracyjnych — eliminacja Gaussa jest nieefektywna, gdyż trzebaby ją niepotrzebnie przeprowadzać dla każdej prawej strony z osobna, co podnosiłoby koszt numeryczny do $O(MN^3) + O(MN^2)$.

Dygresja: równania macierzowe

Zauważmy, że korzystając z własności mnożenia macierzy, równania (13) można zapisać w postaci

$$\mathbf{A}\mathbf{X} = \mathbf{B} \tag{14}$$

gdzie $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{N\times N}$, $\mathbf{X}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{N\times M}$, przy czym

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \dots & x_1^{(M)} \\ x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \dots & x_2^{(M)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_N^{(1)} & x_N^{(2)} & \dots & x_N^{(M)} \end{bmatrix}$$

i analogicznie dla $\mathbf{B}$. Innymi słowy, macierzowy układ równań (14) jest równoważny układowi równań liniowych (13) z M niezależnymi prawymi stronami.

Uwaga — jawna konstrukcja macierzy odwrotnej

Z powyższych uwag widać, że problem jawnej konstrukcji macierzy odwrotnej

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbb{I} \tag{15}$$

jest problemem postaci (14), a więc kolejne kolumny macierzy odwrotnej uzyskujemy rozwiązując kolejne układy (13) dla $i = 1, 2, \ldots, N$, przy czym $\mathbf{b}^{(1)} = [1, 0, 0, \ldots]^T$, $\mathbf{b}^{(2)} = [0, 1, 0, \ldots]^T$ itd. Rozwiązanie układu równań $\mathbf{A}\mathbf{x} = b$ poprzez jawną konstrukcję macierzy odwrotnej, $\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$, wymaga rozwiązania N układów równań liniowych, co oznacza koszt $O(2N^3)$, podczas gdy koszt bezpośredniego rozwiązania równania $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ to $O(N^3)$.

Pojawiający się często we wzorach napis $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$ **zawsze** rozumiemy jako wezwanie do znalezienie wektora $\mathbf{z}$ takiego, że $\mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{b}$.

Przykład

Wyrażenie

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{J}^{-1}\mathbf{f}_n \tag{16}$$

interpretujemy jako

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{z} \tag{17a}$$

gdzie

$$\mathbf{J}\mathbf{z} = \mathbf{f}_n \tag{17b}$$

