Επιστημονικοί Υπολογισμοί(Αριθμητική Γραμμική Αλγεβρα)

Διδάσκων: *Επίκ. Καθηγητής* Φ.Τζαφέρης

18 Απριλίου 2024

Αριθμητική Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

όπου $\mathbf{A}$ $\mathbf{n} \times \mathbf{n}$, είναι **μη ιδιάζων** πίνακας (ή $\mathbf{A}$ **αντιστρέψιμος**),
$\mathbf{x}$, $\mathbf{b}$ διάστασης $n \times 1$.

- ΄μεσοι (ή απευθείας) μέθοδοι $(< - - --$ Κεφάλαιο 2)
- Επαναληπτικές μέθοδοι $(< - - --$ Κεφάλαιο 3)

Κεφάλαιο 2. ΄μεσοι Μέθοδοι για την επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

Αμεσοι μέθοδοι Επίλυσης

Με απαλοιφή

1. Gauss(GE)
2. Gauss-Jordan(GJ)
3. Huard(HU)

Με παραγοντοποίηση

1. LU
2. WZ

Επίλυση άνω τριγωνικού συστήματος $\mathbf{Ux} = \mathbf{z}$

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & \mathbf{0} & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_{n-1} \\ z_n \end{bmatrix}$$

Αλγόριθμος της **προς τα πίσω αντικατάστασης**

1. Διάβασε $\mathbf{n}$
2. Για $\mathbf{i} = \mathbf{1}, \mathbf{2}, \ldots, \mathbf{n}$ επανάλαβε

   για $\mathbf{j} = \mathbf{i}, \mathbf{i}+\mathbf{1}, \ldots, \mathbf{n}$ επανάλαβε

   Διάβασε $\mathbf{u_{ij}}$

   Διάβασε $\mathbf{z_i}$
3. $\mathbf{x_n} = \mathbf{z_n}/\mathbf{u_{n,n}}$
4. Για $\mathbf{i} = \mathbf{n}-\mathbf{1}, \mathbf{n}-\mathbf{2}, \ldots, \mathbf{1}$ επανάλαβε

$$\mathbf{x_i} = (\mathbf{z_i} - \sum_{\mathbf{j}=\mathbf{i}+\mathbf{1}}^{\mathbf{n}} \mathbf{u_{ij}} \mathbf{x_j})/\mathbf{u_{ii}}$$

5. Τύπωσε $\mathbf{x_i}$, $\mathbf{i} = \mathbf{1}, \mathbf{2}, \ldots, \mathbf{n}$
6. Τέλος

Παράδειγμα

Να επιλυθεί το 4×4 άνω τριγωνικό σύστημα :

$$
\begin{array}{rcrcrcrcr}
x_1 & + & 3x_2 & & & & -x_4 & = & -1 \\
 & & x_2 & + & 3x_3 & & -2x_4 & = & -11 \\
 & & & & x_3 & & & = & -1 \\
 & & & & & & x_4 & = & 4
\end{array}
$$

Ο επαυξημένος πίνακας του συστήματος είναι ο :

$$
\begin{bmatrix}
1 & 3 & 0 & -1 & : & -1 \\
 & 1 & 3 & -2 & : & -11 \\
 & & 1 & 0 & : & -1 \\
 & & & 1 & : & 4
\end{bmatrix}
$$

Με προς τα πίσω αντικατάσταση προκύπτει:

$$x_4 = 4$$
$$\Downarrow$$
$$x_3 = -1 - 0x_4 = -1 - 0 \cdot 4 = -1$$
$$\Downarrow$$
$$x_2 = -11 - 3x_3 + 2x_4 = -11 - 3 \cdot (-1) + 2 \cdot 4 = 0$$
$$\Downarrow$$
$$x_1 = -1 - 3x_2 - 0x_3 + x_4 = -1 - 3 \cdot 0 - 0 \cdot (-1) + 4 = 3$$

΄ρα η λύση του συστήματος είναι η τετράδα:

$$x = [x_1, x_2, x_3, x_4] = [3, 0, -1, 4]$$

Μέθοδος Απαλοιφής του Gauss (GE)

Δίνεται το γραμμικό σύστημα

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

όπου $\mathbf{A} \in \mathbf{R}^{\mathbf{n}\times\mathbf{n}}$ είναι ένας αντιστρέψιμος (ή μη ιδιάζων) πίνακας, $\mathbf{x}$, $\mathbf{b} \in \mathbf{R}^{\mathbf{n}}$.

Η μέθοδος GE επιλύει το γραμμικό σύστημα σε δύο φάσεις με τη χρήση δύο διαφορετικών μετασχηματισμών ισοδυναμίας:

Μέθοδος Gauss (GE)

(I) **Φάση τριγωνοποίησης**

$$(\mathbf{A},\ \ \mathbf{b}) \qquad \Rightarrow \qquad (\mathbf{U},\ \ \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b})$$

όπου $\mathbf{A} = \mathbf{L}\cdot\mathbf{U}$, $\mathbf{L}$ κάτω τριγωνικός και $\mathbf{U}$ άνω τριγωνικός πίνακας.

(II) **Φάση αντιστροφής** ενός άνω τριγωνικού πίνακα
(**ή φάση επίλυσης με πρός τα πίσω αντικατάσταση**)

$$(\mathbf{U},\ \ \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b}) \qquad \Rightarrow \qquad (\mathbf{I},\ \ \mathbf{U}^{-1}\mathbf{L}^{-1}\mathbf{b})$$

Περιγραφή της μεθόδου απαλοιφής του Gauss (GE)

I. Φάση τριγωνοποίησης

Η βασική αρχή της μεθόδου GE συνίσταται στο να απαλείφει (δηλ.να μηδενίζει) το ένα μετά το άλλο τα στοιχεία του πίνακα **A** που βρίσκονται κάτω από την κυρία διαγώνιό του με τελικό αποτέλεσμα να προκύψει ένας άνω τριγωνικός πίνακας **U**.

II. Φάση επίλυσης άνω τριγωνικού συστήματος

Η μέθοδος εφαρμόζει τον αλγόριθμο επίλυσης ενός άνω τριγωνικού συστήματος με προς τα πίσω αντικατάσταση.

Η μέθοδος απαλοιφής του Gauss (GE)

Ας θεωρήσουμε το γραμμικό σύστημα

$$
\begin{array}{c}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\
a_{21}^{(1)}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)} \\
a_{31}^{(1)}x_1 + a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{3n}^{(1)}x_n = b_3^{(1)} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\
a_{n1}^{(1)}x_1 + a_{n2}^{(1)}x_2 + a_{n3}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)}
\end{array} \tag{1}
$$

το οποίο μπορεί να γραφεί και

$$
\begin{bmatrix}
\mathbf{a_{11}^{(1)}} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\
a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\
a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \cdots & a_{3n}^{(1)} \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix} \tag{2}
$$

ή απλά

$$A^{(1)}x = b^{(1)}, \quad \text{με} \quad \det A^{(1)} \neq 0 \ \text{ και } \ b^{(1)} \neq \mathbf{0}. \tag{3}$$

1ο βήμα

- **Απαλοιφή του αγνώστου** x_1 από τις γραμμές $i = 2, 3, \cdots, n$, πολλαπλασιάζοντας την **οδηγό** γραμμή 1 με τους πολλαπλασιαστές

$$\mathbf{m_{i1}} = -\frac{\mathbf{a_{i1}^{(1)}}}{\mathbf{a_{11}^{(1)}}}, \quad i = 2, 3, \cdots, n$$

και προσθέτοντας στις γραμμές $i = 2, 3, \cdots, n$, αντίστοιχα.

- **Ενημέρωση**(τροποποίηση) των στοιχείων

$$\mathbf{a_{ij}^{(2)}} = \mathbf{a_{ij}^{(1)}} + \mathbf{m_{i1}a_{1j}^{(1)}}, \quad \mathbf{i = 2, 3, \cdots, n}, \quad \mathbf{j = 2, 3, \cdots, n}$$

και

$$\mathbf{b_i^{(2)}} = \mathbf{b_i^{(1)}} + \mathbf{m_{i1}b_1^{(1)}}, \quad \mathbf{i = 2, 3, \cdots, n}$$

Έτσι προκύπτει το ισοδύναμο σύστημα

$$\begin{array}{rcl}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{1n}^{(1)}x_n &=& b_1^{(1)} \\
a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \ldots + a_{2n}^{(2)}x_n &=& b_2^{(2)} \\
a_{32}^{(2)}x_2 + a_{33}^{(2)}x_3 + \ldots + a_{3n}^{(2)}x_n &=& b_3^{(2)} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots && \vdots \\
a_{n2}^{(2)}x_2 + a_{n3}^{(2)}x_3 + \ldots + a_{nn}^{(2)}x_n &=& b_n^{(2)}
\end{array} \tag{4}$$

1ο βήμα

Το σύστημα μπορεί να γραφτεί

$$\left[\begin{array}{c|cccc} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \ldots & a_{1n}^{(1)} \\ \hline & \mathbf{a_{22}^{(2)}} & a_{23}^{(2)} & \ldots & a_{2n}^{(2)} \\ & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & \ldots & a_{3n}^{(2)} \\ 0 & \vdots & \vdots & \ldots & \vdots \\ & a_{n2}^{(2)} & a_{n3}^{(2)} & \ldots & a_{nn}^{(2)} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x_1 \\ \hline x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} b_1^{(1)} \\ \hline b_2^{(2)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{array}\right]$$

ή απλά

$$A^{(2)}x = b^{(2)}.$$

2ο βήμα

- **Απαλοιφή του αγνώστου** x_2 από τις γραμμές $i = 3, 4, \cdots, n,$ πολλαπλασιάζοντας την **οδηγό** γραμμή 2 με τους πολλαπλασιαστές

$$\mathbf{m_{i2}} = -\frac{\mathbf{a_{i2}^{(2)}}}{\mathbf{a_{22}^{(2)}}}, \quad i = 3, 4, \cdots, n$$

και προσθέτοντας στις γραμμές $i = 3, 4, \cdots, n,$ αντίστοιχα.

- **Ενημέρωση**(τροποποίηση) των στοιχείων

$$\mathbf{a_{ij}^{(3)}} = \mathbf{a_{ij}^{(2)}} + \mathbf{m_{i2} a_{2j}^{(2)}}, \quad \mathbf{i = 3, 4, \cdots, n}, \quad \mathbf{j = 3, 4, \cdots, n}$$

και

$$\mathbf{b_{i}^{(3)}} = \mathbf{b_{i}^{(2)}} + \mathbf{m_{i2} b_{2}^{(2)}}, \quad \mathbf{i = 3, 4, \cdots, n}$$

Έτσι προκύπτει το ισοδύναμο σύστημα

$$\begin{array}{rrrrl}
a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + & a_{13}^{(1)} x_3 & + \ldots + & a_{1n}^{(1)} x_n & = b_1^{(1)} \\
\mathbf{a_{22}^{(2)}} x_2 + & a_{23}^{(2)} x_3 & + \ldots + & a_{2n}^{(2)} x_n & = b_2^{(2)} \\
 & a_{33}^{(3)} x_3 & + \ldots + & a_{3n}^{(3)} x_n & = b_3^{(3)} \\
 & \vdots & \ldots & & \vdots \\
 & a_{n3}^{(3)} x_3 & + \ldots + & a_{nn}^{(3)} x_n & = b_n^{(3)}
\end{array}$$

2ο βήμα

Το σύστημα μπορεί να γραφτεί

$$\left[\begin{array}{cc|ccc} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \hline & & \mathbf{a_{33}^{(3)}} & \dots & a_{3n}^{(3)} \\ & 0 & \vdots & \dots & \vdots \\ & & a_{n3}^{(3)} & \dots & a_{nn}^{(3)} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ \hline x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \hline b_3^{(3)} \\ \vdots \\ b_n^{(3)} \end{array}\right]$$

ή

$$A^{(3)}x = b^{(3)}.$$

Μετά από $r-1$ βήματα

$$
\begin{array}{ccccccccccccc}
+ & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \dots & + & a_{1,r-1}^{(1)}x_{r-1} & + & a_{1,r}^{(1)}x_r & + & \dots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\
 & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \dots & + & a_{2,r-1}^{(2)}x_{r-1} & + & a_{2,r}^{(2)}x_r & + & \dots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
 & & & & & & & & & & & & & \vdots \\
 & & & \dots & & \dots & & \dots & & \dots & & \dots & & \\
 & & & & & a_{r-1,r-1}^{(r-1)}x_{r-1} & + & a_{r-1,r}^{(r-1)}x_r & + & \dots & + & a_{r-1,n}^{(r-1)}x_n & = & b_{r-1}^{(r-1)} \\
 & & & & & & & a_{r,r}^{(r)}x_r & + & \dots & + & a_{rn}^{(r)}x_n & = & b_r^{(r)} \\
 & & & & & & & & & & & & & \vdots \\
 & & & & & & & \dots & & \dots & & \dots & & \\
 & & & & & & & a_{n,r}^{(r)}x_r & + & \dots & + & a_{nn}^{(r)}x_n & = & b_n^{(r)}
\end{array}
$$

$r-1$ βήμα

Το σύστημα μπορεί να γραφτεί

$$\left[\begin{array}{cccc|ccc} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1,r-1}^{(1)} & a_{1r}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2,r-1}^{(2)} & a_{2r}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \mathbf{0} & & \ddots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ & & & a_{r-1,r-1}^{(r-1)} & a_{r-1,r}^{(r-1)} & \dots & a_{r-1,n}^{(r-1)} \\ \hline & & & & \mathbf{a_{rr}^{(r)}} & \dots & a_{rn}^{(r)} \\ & \mathbf{0} & & & \vdots & \dots & \vdots \\ & & & & a_{nr}^{(r)} & \dots & a_{nn}^{(r)} \end{array}\right] \left[\begin{array}{c} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{r-1} \\ \hline x_r \\ \vdots \\ x_n \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots \\ b_{r-1}^{(r-1)} \\ \hline b_r^{(r)} \\ \vdots \\ b_n^{(r)} \end{array}\right]$$

ή

$$A^{(r)}x = b^{(r)}.$$

Τελικά, μετά από $n-1$ βήματα

το αρχικό σύστημα μετατρέπεται στο ακόλουθο άνω τριγωνικό σύστημα εξισώσεων

$$\begin{array}{rcl}
a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{1,r-1}^{(1)}x_{r-1} + a_{1,r}^{(1)}x_r + \ldots + a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\
a_{22}^{(2)}x_2 \ldots + a_{2,r-1}^{(2)}x_{r-1} + a_{2,r}^{(2)}x_r + \ldots + a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & & \vdots \\
a_{n-1,n-1}^{(n-1)}x_{n-1} + a_{n-1,n}^{(n-1)}x_n & = & b_{n-1}^{(n-1)} \\
a_{nn}^{(n)}x_n & = & b_n^{(n)}
\end{array} \tag{5}$$

ή

$$A^{(n)}x = b^{(n)}, \tag{6}$$

όπου $A^{(n)}$ είναι ένας άνω τριγωνικός πίνακας.

Το σύστημα μπορεί να λυθεί πολύ εύκολα με την **προς τα πίσω αντικατάσταση** από τον τύπο

$$x_n = \frac{b_n^{(n)}}{a_{nn}^{(n)}}$$

και

$$x_i = \frac{b_i^{(i)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i)} x_j}{a_{ii}^{(i)}}, \quad i = n-1(-1)1. \tag{7}$$

Η μέθοδος απαλοιφής του Gauss ως ακολουθία πινάκων

Πιο αναλυτικά η μέθοδος απαλοιφής του Gauss δημιουργεί μία ακολουθία από πίνακες $\left\{A^{(k)}\right\}, k = 1, 2, \ldots, n$, όπου $A^{(1)} = A$ και μια ακολουθία από δεξιά μέλη $\left\{b^{(k)}\right\}, k = 1, 2, \ldots, n$ τέτοια ώστε ο $A^{(n)}$ είναι ένας άνω τριγωνικός πίνακας.

1ο βήμα

΄ν χρησιμοποιήσουμε τους συμβολισμούς

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} \\ b_i^{(1)} &= b_i \end{aligned} \quad , \quad i = 1, 2, \ldots, n, \quad j = 1, 2, \ldots, n,$$

τότε προκειμένου να απαλειφθεί ο x_1 από την i-οστή εξίσωση του (1) για $i = 2, 3, \ldots, n$, πολλαπλασιάζουμε επι m_{i1} την πρώτη εξίσωση, η οποία καλείται *οδηγός εξίσωση*, και την προσθέτουμε στην i-οστή εξίσωση, όπου

$$m_{i1} = -\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n \tag{8}$$

με $a_{11}^{(1)} \neq 0$. Το $a_{11}^{(1)}$ καλείται *οδηγό στοιχείο*.

Το αποτέλεσμα της ανωτέρω εργασίας είναι το ακόλουθο

$$\left[a_{i2}^{(1)} + m_{i1} a_{12}^{(1)}\right] x_2 + \ldots + \left[a_{in}^{(1)} + m_{i1} a_{1n}^{(1)}\right] x_n = b_1^{(1)} + m_{i1} b_1^{(1)}$$

ή

$$a_{i2}^{(2)} x_2 + \ldots + a_{in}^{(2)} x_n = b_i^{(2)}, \quad i = 2, 3, \ldots, n$$

όπου

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} + m_{i1} a_{1j}^{(1)}, \quad i = 2, 3, \ldots, n, \quad j = 2, 3, \ldots, n \tag{9}$$

και

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} + m_{i1} b_1^{(1)}, \quad i = 2, 3, \ldots, n.$$

Παρατηρούμε ότι ο άγνωστος x_1 πράγματι απαλείφεται από την i-οστή εξίσωση αφού

$$a_{i1}^{(2)} = a_{i1}^{(1)} + m_{i1} a_{11}^{(1)} = 0,$$

όπου η τελευταία ισότητα ισχύει λόγω της (8).

2ο βήμα

Στη συνέχεια θεωρούμε το σύστημα που αποτελείται από όλες τις εξισώσεις εκτός από την οδηγό, δηλαδή από τις $n-1$ εξισώσεις

$$\begin{array}{ccccc} a_{22}^{(2)}x_2 + \ldots + a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ \vdots \quad \ldots \quad \vdots & & \vdots \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + \ldots + a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)}. \end{array}$$

Έτσι αν $a_{22}^{(2)} \neq 0$, τότε ορίζουμε τους πολλαπλασιαστές m_{i2} για την απαλοιφή του x_2 από τις $n-2$ τελευταίες εξισώσεις κ.ο.κ. Κατ' αυτόν τον τρόπο καταλήγουμε στο άνω τριγωνικό σύστημα (5) (ή (6)).

Μπορούμε τώρα εύκολα να παρατηρήσουμε ότι αν $M^{(1)}$ είναι ο πίνακας

$$M^{(1)} = \left[\begin{array}{c|c} 1 & 0 \\ \hline m_{21} & \\ m_{31} & I_{n-1} \\ \vdots & \\ m_{n1} & \end{array}\right] \tag{10}$$

τότε το πρώτο βήμα της απαλοιφής του Gauss μπορεί να γίνει πολλαπλασιάζοντας από αριστερά το αρχικό σύστημα επί $M^{(1)}$. Έτσι έχουμε

$$M^{(1)}A^{(1)}x = M^{(1)}b^{(1)} \tag{11}$$

ή

$$A^{(2)}x = b^{(2)} \tag{12}$$

όπου

$$A^{(2)} = M^{(1)}A^{(1)} \text{ και } b^{(2)} = M^{(1)}b^{(1)}.$$

Θεώρημα

Το σύστημα $A^{(1)}x = b^{(1)}$ είναι ισοδύναμο με το σύστημα $A^{(2)}x = b^{(2)}$.

Απόδειξη

Υποθέσαμε ότι το (1) έχει μια μοναδική λύση, δηλαδή $\det A^{(1)} \neq 0$. Επίσης από την (11) και (12) έχουμε

$$A^{(2)} = M^{(1)}A^{(1)}$$

ή

$$\det A^{(2)} = \left[\det M^{(1)}\right]\left[\det A^{(1)}\right] = \det A^{(1)} \neq 0$$

επειδή $\det M^{(1)} = 1$. ΄ρα ο $A^{(2)}$ είναι μη ιδιάζων και το σύστημα (4) έχει μία μοναδική λύση. Αλλά η (11) δείχνει ότι η λύση του (1) ικανοποιεί το (4), συνεπώς οι μοναδικές λύσεις των(1) και (4) ταυτίζονται.

r βήμα

Μετά από $r-1$ απαλοιφές θα έχουμε, αν $a_{rr}^{(r)} \neq 0$, την οδηγό εξίσωση

$$a_{rr}^{(r)} x_r + \ldots + a_{rn}^{(r)} x_n = b_r^{(r)}.$$

Προκειμένου να απαλειφθεί ο x_r από τις υπόλοιπες $n-r$ εξισώσεις m_{ir} φορές την οδηγό εξίσωση στην i-οστή για $i = r+1, r+2, \ldots, n$. Έτσι ορίζοντας τους πολλαπλασιαστές

$$m_{ir} = -\frac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, \quad i = r+1, r+2, \ldots, n$$

έχουμε

$$\left[a_{i,r+1}^{(r)} + m_{ir} a_{r,r+1}^{(r)}\right] x_{r+1} + \ldots + \left[a_{in}^{(r)} + m_{ir} a_{rn}^{(r)}\right] x_n = \left[b_i^{(r)} + m_{ir} b_r^{(r)}\right]$$

η οποία μπορεί να γραφεί σαν

$$a_{i,r+1}^{(r+1)} x_{r+1} + \ldots + a_{in}^{(r+1)} x_n = b_i^{(r+1)}, \quad i = r+1, r+2, \ldots, n$$

r βήμα

Εύκολα διαπιστώνεται ότι αν

$$M^{(r)} = \left[\begin{array}{c|ccccc} I_{r-1} & 0 & & \cdots & & 0 \\ \hline 0 & 1 & & & & \\ & m_{r+1,r} & 1 & & \text{O} & \\ \vdots & m_{r+2,r} & 0 & 1 & & \\ & \vdots & \vdots & & \ddots & \\ 0 & m_{n,r} & 0 & \cdots & & 1 \end{array}\right] \tag{15}$$

τότε το r βήμα της απαλοιφής περιγράφεται από την

$$M^{(r)}A^{(r)}x = M^{(r)}b^{(n)}$$

ή

$$A^{(r+1)}x = b^{(r+1)}.$$

Παρατηρούμε λοιπόν ότι η όλη διαδικασία της τριγωνοποίησης του αρχικού πίνακα $A^{(1)}(= A)$ των συντελεστών των αγνώστων μπορεί να περιγραφεί σαν τον πολλαπλασιασμό του αρχικού συστήματος επί τον πίνακα

$$M = M^{(n-1)} \dots M^{(2)} M^{(1)}. \tag{16}$$

΄ρα η

$$MA^{(1)}x = Mb^{(1)} \tag{17}$$

παράγει την

$$A^{(n)}x = b^{(n)}. \tag{18}$$

Θεώρημα

Το σύστημα $A^{(n)}x = b^{(n)}$ είναι ισοδύναμο με το σύστημα $A^{(1)}x = b^{(1)}$.

Απόδειξη

Η απόδειξη είναι όμοια με εκείνη του προηγούμενου Θεωρήματος.

Επίλυση των ℓ γραμμικών συστημάτων

$$\mathbf{A}\mathbf{x_k} = \mathbf{b_k}, \qquad \mathbf{k} = \mathbf{1}(\mathbf{1})\ell$$

όπου $\mathbf{x_k} = [\mathbf{x_{1k}}, \mathbf{x_{2k}}, \ldots, \mathbf{x_{nk}}]^T$ και $\mathbf{b_k} = [\mathbf{b_{1k}}, \mathbf{b_{2k}}, \ldots, \mathbf{b_{nk}}]^T$

το οποίο γράφεται συμβολικά:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{X} = \mathbf{B}$$

όπου $\mathbf{X}, \mathbf{B}$ $\mathbf{n} \times \ell$ πίνακες (συνήθως $\ell \leq \mathbf{n}$).

Αν υποθέσουμε $\mathbf{det}(\mathbf{A}) \neq \mathbf{0}$, μπορούμε να εφαρμόσουμε τη μέθοδο απαλοιφής του Gauss στον επαυξημένο πίνακα $[\mathbf{A} : \mathbf{B}]$.

Ειδική περίπτωση $\quad \mathbf{B} = \mathbf{I}$

Υπολογισμός του αντιστρόφου $\mathbf{A}^{-1}$

$$\mathbf{A}\,\mathbf{X} = \mathbf{I}$$

ή

$$\mathbf{A}\mathbf{x_k} = \mathbf{e_k}, \quad \mathbf{k} = 1, 2, \ldots, \mathbf{n}$$

Υπολογισμός της ορίζουσας $\det(A)$

Η τιμή της ορίζουσας ενός πίνακα είναι το γινόμενο των οδηγών στοιχείων στη μέθοδο της απαλοιφής του Gauss.

Δηλαδή :

$$\det(A) = a_{11}^{(1)}\, a_{22}^{(2)}\, a_{33}^{(3)} \cdots a_{nn}^{(n)}$$

Τροποποίηση της μεθόδου Απαλοιφής του Gauss

- Είναι φανερό ότι αν κάποιο οδηγό στοιχείο είναι μηδέν τότε η μέθοδος GE σταματά.
- Για να αποφύγουμε μια τέτοια περίπτωση πρέπει ο προηγούμενος αλγόριθμος να αναζητά τους συντελεστές της **r** στήλης κάτω από την κύρια διαγώνιο μέχρις ότου βρεθεί ένας ο οποίος είναι διάφορος του μηδενός, έστω ο
$$\mathbf{a}_{\mathbf{ir}}^{(\mathbf{r})}.$$
- Στην συνέχεια εναλλάσει τις **i** και **r** γραμμές και χρησιμοποιεί τη νέα εξίσωση σάν οδηγό.
- Η διαδικασία αυτή δεν αλλάζει το μαθηματικό πρόβλημα καθ'όσον η τυπική λύση του συστήματος είναι ανεξάρτητη από την διάταξη των εξισώσεων στο σύστημα.

Θεώρημα 3.1.3.

Αν ο $\mathbf{A}^{(1)}$ είναι αντιστρέψιμος(δηλ. μη ιδιάζων), τότε υπάρχει ένας μη μηδενικός συντελεστής $\mathbf{a}_{ir}^{(r)}$.

Θεώρημα 3.1.4.

Το σύστημα $\mathbf{A}^{(1)}\ \mathbf{x} = \beta^{(1)}$ είναι ισοδύναμο με το σύστημα $\mathbf{A}^{(n)}\ \mathbf{x} = \beta^{(n)}$.

- Στο προηγούμενο παράδειγμα η αναγκαία ανταλλαγή γραμμών εφαρμόστηκε άμεσα έτσι ώστε να μην ξεφύγει η προσοχή μας από την στρατηγική της μερικής οδήγησης.
- Στην πράξη, είναι πιο αποτελεσματικό να κάνουμε τις ανταλλαγές των γραμμών με ένα έμμεσο τρόπο.
- Αυτό επιτυγχάνεται με την χρήση ενός διανύσματος διάστασης n, τέτοιου ώστε το i-οστό στοιχείο του να δηλώνει τη γραμμή του πίνακα που περιέχει τους συντελεστές της i-οστής εξίσωσης.
- Ας συμβολίσουμε με h το διάνυσμα αυτό με αρχικές τιμές την αρίθμηση των γραμμών, δηλαδή

$$h = [1,\ 2,\ 3, \ldots, n]^T.$$

  Έτσι, κάθε φορά που απαιτείται ανταλλαγή δύο γραμμών, αρκεί μόνο η αντιμετάθεση των αντίστοιχων στοιχείων του διανύσματος.
- Κάθε αναφορά σε μια γραμμή του πίνακα συντελεστών ή σε ένα στοιχείο του διανύσματος του δεξιού μέλους πρέπει να γίνει μέσω του διανύσματος h.

Ο αλγόριθμος απαλοιφής του Gauss *με μερική οδήγηση*

1. Διάβασε τα δεδομένα n, $A = \left(a_{ij}\right)$, $1 \leq i, j \leq n$ και $b = \left(b_i\right)$, $1 \leq i \leq n$.
2. Για $i = 1, 2, \ldots, n$ να τεθεί $a_{i,n+1} = b_i$.
3. Για $i = 1, 2, \ldots, n$ να τεθεί

$$h(i) = i$$

4. Για $r = 1, 2, \ldots, n-1$ να εκτελεστούν τα βήματα 4.1-4.4 (διαδικασία απαλοιφής).
   4.1. Έστω p ο μικρότερος ακέραιος με

$$r \leq p \leq n$$

   και

$$|a(h(p), r)| = \max_{r \leq j \leq n} |a(h(j), r)|$$

   4.2. Αν $a(h(p), r) = 0$ τότε τύπωσε ``δεν υπάρχει μοναδική λύση''. Τέλος.
   4.3. Αν $h(r) \neq h(p)$ τότε (ανταλλαγή των τιμών των $h(p)$ και $h(r)$)

$$\begin{aligned} q &= h(r) \\ h(r) &= h(p) \\ h(p) &= q \end{aligned}$$

   (προσομοίωση της φυσικής ανταλλαγής των γραμμών).

4.4. Για $i = r+1, r+2, \ldots, n$ να εκτελεστούν τα βήματα 4.4.1 και 4.4.2

4.4.1. Να τεθεί

$$m(h(i), r) = -\frac{a(h(i), r)}{a(h(r), r)}$$

4.4.2. Για $j = r+1, r+2, \ldots, n+1$ να εκτελεσθεί

$$a(h(i), j) = a(h(i), j) + m(h(i), r)a(h(r), j)$$

Αν $a(h(n), n) = 0$ τότε τύπωσε ``δεν υπάρχει μοναδική λύση''. Πήγαινε στο τέλος.

Επίλυση τριγωνικού συστήματος(με προς τα πίσω αντικατάσταση)

5 Να τεθεί

$$x_n = a(h(n), n+1)/a(h(n), n)$$

6 Για $i = n-1, n-2, \ldots, 1$ να υπολογιστούν οι

$$x_i = \frac{a(h(i), n+1) - \sum_{j=i+1}^{n} a(h(i), j)x_j}{a(h(i), i)}$$

7 Εκτύπωση της λύσης x_i, $i = 1, 2, \ldots, n$. Τέλος.

Παρατήρηση

Ενώ για αρκετά γραμμικά συστήματα η μερική οδήγηση παράγει ικανοποιητικά αποτελέσματα, υπάρχουν περιπτώσεις όπου η τεχνική αυτή δεν είναι αρκετή.

Παράδειγμα

Έστω το γραμμικό σύστημα

$$\begin{array}{rcrcl} 30.00x_1 & + & 591400x_2 & = & 591700 \\ 5.291 & - & 6.130x_2 & = & 46.78. \end{array}$$

Αν εφαρμοστεί ο προηγούμενος αλγόριθμος με αριθμητική τεσσάρων ψηφίων θα έχουμε

$$m_{21} = \frac{5.291}{30.00} = 0.1764$$

που οδηγεί στο σύστημα

$$\begin{array}{rcrcrr} 30.00x_1 & + & 591400x_2 & = & & 591700 \\ & - & 104300x_2 & = & - & 104400 \end{array}$$

το οποίο έχει τις λύσεις $x_2 = 1.001$ και $x_1 = -10.00$.
Ωστόσο οι ακριβείς λύσεις του αρχικού συστήματος είναι οι $x_1 = 10.00$ και $x_2 = 1.000$.

- Μία διαδικασία μερικής οδήγησης, η οποία θα μπορούσε να αντεπεξέλθει τη δυσκολία αυτή για τις οποίες η προηγούμενη μέθοδος παρουσιάζει πρόβλημα είναι η λεγόμενη **βαθμωτή (scaled) μερική οδήγηση**.
- Στην τεχνική αυτή διαιρούνται οι γραμμές, από την οδηγό μέχρι την τελευταία, με τον εκάστοτε μεγαλύτερο κατά απόλυτο τιμή συντελεστή της κάθε γραμμής.
- Στη συνέχεια εφαρμόζεται η μερική οδήγηση. Για το παράδειγμα αυτό έχουμε
$$\frac{30.00}{591400} = 0.00005073 \quad \text{και} \quad \frac{5.291}{6.130} = 0.8631$$
οπότε εναλλάσονται οι δύο γραμμές και το αποτέλεσμα της απαλοιφής δίνει τις ακριβείς λύσεις.

Βαθμωτή (scaled) μερική οδήγηση

Οι δε αλλαγές που διαφέρουν από την προηγούμενη μέθοδο είναι στα βήματα 3-4.1, τα οποία θα πρέπει να αντικατασταθούν με τα:

3. Για $i = 1, 2, \ldots, n$ να εκτελεσθούν τα βήματα 3.1-3.3
    - 3.1. $s_i = \max_{1 \leq j \leq n} |a_{ij}|$
    - 3.2. Αν $s_i = 0$ τότε τύπωσε ``δεν υπάρχει μοναδική λύση''
    - 3.3. $h[i] = i$
4. Για $r = 1, 2, \ldots, n-1$ να εκτελεστούν τα βήματα 4.1-4.4
    - 4.1. Έστω p ο μικρότερος ακέραιος με $r \leq p \leq n$ και

$$\frac{|a(h(p), r)|}{s(h(p))} = \max_{r \leq j \leq n} \frac{|a(h(j), r)|}{s(h(j))}.$$

Η ανωτέρω τεχνική μπορεί επίσης να πραγματοποιηθεί αν πολλαπλασιάσουμε την εξίσωση $Ax = b$ με το διαγώνιο πίνακα D^{-1} του οποίου το i-οστό διαγώνιο στοιχείο είναι το $(s_i)^{-1}$.

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου απαλοιφής του Gauss

Ας υποθέσουμε ότι βρισκόμαστε στο k βήμα της απαλοιφής του Gauss για τη λύση ℓ συστημάτων δηλαδή:

$$
\begin{array}{r}
\\ \\ \\ \\ \\ \\
n-k \left\{ \begin{array}{c} \\ \\ \\ \end{array} \right.
\end{array}
\left[\begin{array}{ccccc|ccc}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1n} \\
 & \hat{a}_{22} & \hat{a}_{23} & \cdots & \hat{a}_{2k} & \hat{a}_{2,k+1} & \cdots & \hat{a}_{2n} \\
 & & \hat{a}_{33} & \cdots & \hat{a}_{3k} & \hat{a}_{3,k+1} & \cdots & \hat{a}_{3n} \\
 & 0 & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & & \hat{a}_{kk} & \hat{a}_{k,k+1} & \cdots & \hat{a}_{kn} \\
\hline
 & & & & \hat{a}_{k+1,k} & \hat{a}_{k+1,k+1} & \cdots & \hat{a}_{k+1,n} \\
 & 0 & & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & & \hat{a}_{nk} & \hat{a}_{n,k+1} & \cdots & \hat{a}_{nn}
\end{array}\right]
\begin{bmatrix}
x_1^{(1)} & x_1^{(2)} & \cdots & x_1^{(\ell)} \\
x_2^{(1)} & x_2^{(2)} & \cdots & x_2^{(\ell)} \\
x_3^{(1)} & x_3^{(2)} & \cdots & x_3^{(\ell)} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
x_k^{(1)} & x_k^{(2)} & \cdots & x_k^{(\ell)} \\
x_{k+1}^{(1)} & x_{k+1}^{(2)} & \cdots & x_{k+1}^{(\ell)} \\
\vdots & \vdots & & \vdots \\
x_n^{(1)} & x_n^{(2)} & \cdots & x_n^{(\ell)}
\end{bmatrix}
=
$$

$$\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{n-k}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της GE

$$= \left[\begin{array}{cccc} b_1^{(1)} & b_1^{(2)} & \cdots & b_1^{(\ell)} \\ \hat{b}_2^{(1)} & \hat{b}_2^{(2)} & \cdots & \hat{b}_2^{(\ell)} \\ \hat{b}_3^{(1)} & \hat{b}_3^{(2)} & \cdots & \hat{b}_3^{(\ell)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \hat{b}_k^{(1)} & \hat{b}_k^{(2)} & \cdots & \hat{b}_k^{(\ell)} \\ \hline \vdots & \vdots & & \vdots \\ \hat{b}_n^{(1)} & \hat{b}_n^{(2)} & \cdots & \hat{b}_n^{(\ell)} \end{array}\right] \tag{19}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της GE

$$
\begin{array}{c}
\\ \\ \\ \\ \\ \\
-k\left\{\begin{array}{c} \\ \\ \\ \end{array}\right.
\end{array}
\left[\begin{array}{ccccc|ccc:cccc}
a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1n} & a_{1,n+1} & a_{1,n+2} & \cdots & a_{1,n+\ell} \\
 & \hat{a}_{22} & \hat{a}_{23} & \cdots & \hat{a}_{2k} & \hat{a}_{2,k+1} & \cdots & \hat{a}_{2n} & \hat{a}_{2,n+1} & \hat{a}_{2,n+2} & \cdots & \hat{a}_{2,n+\ell} \\
 & & \hat{a}_{33} & \cdots & \hat{a}_{3k} & \hat{a}_{3,k+1} & \cdots & \hat{a}_{3n} & \hat{a}_{3,n+1} & \hat{a}_{3,n+2} & \cdots & \hat{a}_{3,n+\ell} \\
 & 0 & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & & \hat{a}_{kk} & \hat{a}_{k,k+1} & \cdots & \hat{a}_{kn} & \hat{a}_{k,n+1} & \hat{a}_{k,n+2} & \cdots & \hat{a}_{k,n+\ell} \\
\hline
 & & & & \hat{a}_{k+1,k} & \hat{a}_{k+1,k+1} & \cdots & \hat{a}_{k+1,n} & \hat{a}_{k+1,n+1} & \hat{a}_{k+1,n+2} & \cdots & \hat{a}_{k+1,n+\ell} \\
 & 0 & & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & & \hat{a}_{nk} & \hat{a}_{n,k+1} & \cdots & \hat{a}_{nn} & \hat{a}_{n,n+1} & \hat{a}_{n,n+2} & \cdots & \hat{a}_{n,n+\ell}
\end{array}\right] =
$$

$$
\underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad}_{n-k} \qquad \underbrace{\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad}_{\ell}
$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της GE

Επειδή τώρα $k = 1(1)n-1$ το πλήθος και το είδος των πράξεων για την τριγωνοποίηση του συστήματος θα είναι

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k) \qquad \text{διαιρέσεις}$$

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+\ell) \qquad \text{πολλαπλασιασμοί} \tag{20}$$

και

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(n-k+\ell) \qquad \text{προσθαφαιρέσεις.}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της GE

Χρησιμοποιώντας τους τύπους

$$\sum_{k=1}^{m} k = \frac{m(m+1)}{2} \qquad \text{και} \qquad \sum_{k=1}^{m} k^2 = \frac{m(m+1)(2m+1)}{6}$$

$$\frac{n(n-1)}{2} \quad \text{διαιρέσεις}$$

$$\frac{n(n-1)(2n-1+3\ell)}{6} \quad \text{πολλαπλασιασμοί} \tag{21}$$

και

$$\frac{n(n-1)(2n-1+3\ell)}{6} \quad \text{προσθαφαιρέσεις.}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της GE

Συνεπώς για τον υπολογισμό όλων των $x_k^{(i)}$ απαιτούνται

$$\ell \sum_{k=1}^{n} 1 \qquad \text{διαιρέσεις}$$

$$\ell \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \qquad \text{πολλαπλασιασμοί}$$

και

$$\ell \sum_{k=1}^{n-1} (n-k) \qquad \text{προσθαφαιρέσεις}$$

δηλαδή

$$\begin{aligned} n\ell & \qquad \text{διαιρέσεις} \\ \frac{n(n-1)\ell}{2} & \qquad \text{πολλαπλασιασμοί} \end{aligned} \tag{22}$$

και

$$\frac{n(n-1)\ell}{2} \qquad \text{προσθαφαιρέσεις.}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της GE

Συνεπώς το συνολικό πλήθος των πράξεων για την εύρεση της λύσης

$$\frac{n(n-1+2\ell)}{2} \qquad \text{διαιρέσεις}$$

$$\frac{n(n-1)(2n-1+6\ell)}{6} \qquad \text{πολλαπλασιασμοί} \tag{23}$$

και

$$\frac{n(n-1)(2n-1+6\ell)}{6} \qquad \text{προσθαφαιρέσεις.}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της GE

Έτσι λοιπόν για την επίλυση ενός μόνον γραμμικού συστήματος ($\ell = 1$) η μέθοδος απαλοιφής του Gauss απαιτεί

$$\begin{aligned} \frac{n^2}{2} + \frac{n}{2} & \quad \text{διαιρέσεις} \\ \frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5n}{6} & \quad \text{πολλαπλασιασμοί} \\ \frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5n}{6} & \quad \text{προσθαφαιρέσεις.} \end{aligned} \tag{24}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα

Για την εύρεση του αντιστρόφου A^{-1} με τη μέθοδο της απαλοιφής του Gauss ($\ell = n$) απαιτούνται

$$\begin{aligned} &\frac{3n^2}{2} - \frac{n}{2} && \text{διαιρέσεις} \\ \frac{4n^3}{3} - &\frac{3n^2}{2} - \frac{n}{6} && \text{πολλαπλασιασμοί} \end{aligned} \tag{25}$$

και

$$\frac{4n^3}{3} - \frac{3n^2}{2} - \frac{n}{6} \qquad \text{προσθαφαιρέσεις.}$$

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι το πλήθος των πράξεων για τη λύση ενός γραμμικού συστήματος με τη μέθοδο της απαλοιφής του Gauss είναι της τάξης $O\left(n^3/3\right)$ ενώ για την εύρεση του αντιστρόφου απαιτείται τετραπλάσιο πλήθος πράξεων. Έτσι πάντοτε αποφεύγουμε να υπολογίσουμε τον αντίστροφο ενός πίνακα (είναι προτιμότερο να λύσουμε το σύστημα) εκτός αν μας ζητείται μόνον ο A^{-1}.

Η μέθοδος απαλοιφής του Jordan (J)

Με την χρήση της μεθόδου της απαλοιφής του Jordan ο πίνακας των συντελεστών των αγνώστων μετασχηματίζεται σε ένα διαγώνιο πίνακα.

1ο βήμα

Το πρώτο βήμα της απαλοιφής του Jordan είναι ακριβώς ίδιο με εκείνο της μεθόδου απαλοιφής του Gauss

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & a_{13}^{(1)}x_3 & + & \dots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\
 & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & a_{23}^{(2)}x_3 & + & \dots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
 & & a_{32}^{(2)}x_2 & + & a_{33}^{(2)}x_3 & + & \dots & + & a_{3n}^{(2)}x_n & = & b_3^{(2)} \\
 & & \vdots & & & & & & & & \\
 & & a_{n2}^{(2)}x_2 & + & a_{n3}^{(2)}x_3 & + & \dots & + & a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)}
\end{array}
\tag{26}
$$

2ο βήμα

Στο δεύτερο βήμα της μεθόδου της απαλοιφής του Jordan απαλείφεται ο x_2 όχι μόνο από τις $n-2$ τελευταίες εξισώσεις, αλλά συγχρόνως και από την πρώτη. Έτσι λαμβάνουμε το σύστημα

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
a_{11}^{(1)}x_1 & & & & a_{13}^{(3)}x_3 & + & \dots & + & a_{1n}^{(3)}x_n & = & b_1^{(3)} \\
 & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & a_{23}^{(3)}x_3 & + & \dots & + & a_{2n}^{(3)}x_n & = & b_2^{(3)} \\
 & & & & a_{33}^{(3)}x_3 & + & \dots & + & a_{3n}^{(3)}x_n & = & b_3^{(3)} \\
 & & & & \vdots & & & & & & \\
 & & & & a_{n3}^{(3)}x_3 & + & \dots & + & a_{nn}^{(3)}x_n & = & b_n^{(3)}
\end{array}
\tag{27}
$$

ή

$$A^{(3)}x = b^{(3)} \tag{28}$$

αν υποθέσουμε ότι αλλάζουμε τους επάνω δείκτες των συντελεστών της δεύτερης γραμμής εκτός του πρώτου.

$r-1$ βήμα

Μετά από $r-1$ τέτοια βήματα θα έχουμε το σύστημα

$$
\begin{array}{cccccccc}
a_{11}^{(1)}x_1 & & & & +a_{1r}^{(r)}x_r + \ldots + a_{1n}^{(r)}x_n & = & b_1^{(r)} \\
 & a_{22}^{(2)}x_2 & & & +a_{2r}^{(r)}x_r + \ldots + a_{2n}^{(r)}x_n & = & b_2^{(r)} \\
 & & \ddots & & \vdots & & \\
 & & & a_{r-1,r-1}^{(r-1)}x_{r-1} & +a_{r-1,r}^{(r)}x_r \ldots + a_{r-1,n}^{(r)}x_n & = & b_{r-1}^{(r)} \\
 & & & & a_{rr}^{(r)}x_r + \ldots + a_{rn}^{(r)}x_n & = & b_r^{(r)} \\
 & & & & \vdots & & \\
 & & & & a_{nr}^{(r)}x_r + \ldots + a_{nn}^{(r)}x_n & = & b_n^{(r)}
\end{array} \tag{29}
$$

ή

$$A^{(r)}x = b^{(r)}$$

όπου πάλι για λόγους ομοιομορφίας αλλάξαμε τους επάνω δείκτες των συντελεστών της $r-1$ γραμμής εκτός του πρώτου.

n βήμα

Τέλος, μετά από n τέτοια βήματα θα έχουμε το διαγώνιο σύστημα:

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}^{(1)}x_1 & & & & = & b_1^{(n+1)} \\ & a_{22}^{(2)}x_2 & & & = & b_2^{(n+1)} \\ & & \ddots & & & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n)}x_n & = & b_n^{(n+1)} \end{array} \tag{30}$$

το οποίο μπορεί να γραφεί σαν

$$A^{(n)}x = b^{(n+1)} \tag{31}$$

όπου ο $A^{(n)}$ τώρα είναι ένας διαγώνιος πίνακας. Η λύση του συστήματος είναι η

$$x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i)}} b_i^{(n+1)}$$

εφόσον $a_{ii}^{(i)} \neq 0, i = 1(1)n$.

Η μέθοδος απαλοιφής του Jordan(αναλυτικά)

Αναλυτικώτερα χρησιμοποιούμε πάλι τους συμβολισμούς

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(1)} &= a_{ij} \quad i,j = 1(1)n \\ b_i^{(1)} &= b_i \quad\ \ i = 1(1)n \end{aligned}$$

και αν $a_{11}^{(1)} \neq 0$, τότε ορίζουμε τους πολλαπλασιαστές

$$m_{i1} = -\frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2(1)n.$$

Τώρα προκειμένου να απαλειφθεί ο x_1 από την i-οστή εξίσωση, προσθέτουμε m_{i1} φορές την πρώτη εξίσωση στην i-οστή, οπότε λαμβάνουμε

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} + m_{ij} a_{1j}^{(1)}, \quad \begin{array}{l} i = 1(1)n,\ i \neq 1 \\ j = 1(1)n \end{array}$$

και

$$b_i^{(2)} = b_i^{(1)} + m_{i1} b_1^{(1)}, \qquad i = 1(1)n,\ i \neq 1.$$

Η μέθοδος απαλοιφής του Jordan

Στο σημείο αυτό παρατηρούμε ότι πριν ακολουθήσει το δεύτερο βήμα θα πρέπει για λόγους ομοιομορφίας να κάνουμε τις αντικαταστάσεις

$$\begin{aligned} a_{1j}^{(2)} &= a_{1j}^{(1)}, \quad j = 2(1)n \\ b_1^{(2)} &= b_1^{(1)}. \end{aligned}$$

Στο τελευταίο βήμα τώρα απαλείφεται ο άγνωστος x_2 τόσο από τις τελευταίες $n-2$ εξισώσεις όσο και από την πρώτη, οπότε λαμβάνουμε

$$a_{ij}^{(3)} = a_{ij}^{(2)} + m_{i2} a_{1j}^{(2)}, \quad i = 1(1)n, i \neq 2, j = 2(1)n$$

και

$$b_i^{(3)} = b_i^{(2)} + m_{i2} b_2^{(2)}, \quad i = 1(1)n, i \neq 2$$

όπου για λόγους ομοιομορφίας θέτουμε

$$\begin{aligned} a_{2j}^{(3)} &= a_{2j}^{(2)}, \quad j = 3(1)n \\ b_2^{(3)} &= b_2^{(2)}. \end{aligned}$$

Η μέθοδος απαλοιφής του Jordan ως ακολουθία πινάκων

Υπό μορφή πινάκων η μέθοδος του Jordan αναζητεί ένα μη ιδιάζοντα $n \times n$ πίνακα M για τον οποίο να ισχύει

$$MAx = Mb \tag{32}$$

με

$$MA = I. \tag{33}$$

Συνεπώς

$$M = A^{-1} \tag{34}$$

και

$$x = Mb. \tag{35}$$

Αν υποθέσουμε ότι το αρχικό σύστημα είναι το

$$A^{(1)}x = b^{(1)} \tag{36}$$

τότε μπορούμε να παρατηρήσουμε εύκολα ότι αν $M^{(1)}$ είναι ο πίνακας

$$M^{(1)} = \left[\begin{array}{c|c} \mu_{11} & 0 \\ \hline \mu_{21} & \\ \mu_{31} & I_{n-1} \\ \vdots & \\ \mu_{n1} & \end{array}\right] \tag{37}$$

όπου

$$\mu_{i1} = \begin{cases} \dfrac{1}{a_{11}^{(1)}}, & i = 1 \\ -\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, & i \neq 1 \end{cases} \quad \text{με } a_{11}^{(1)} \neq 0. \tag{38}$$

Το πρώτο βήμα της απαλοιφής του Jordan μπορεί να γίνει με τον πολλαπλασιασμό από αριστερά του συστήματος (36) επί τον $M^{(1)}$, δηλαδή

$$M^{(1)}A^{(1)}x = M^{(1)}b \tag{39}$$

ή

$$A^{(2)}x = b^{(2)}. \tag{40}$$

Έτσι το r βήμα της απαλοιφής θα περιγράφεται από την εξίσωση

$$M^{(r)}A^{(r)}x = M^{(r)}b \tag{41}$$

όπου

$$M^{(r)} = \left[\begin{array}{ccc|c|ccc} & & & \mu_{1r} & & & \\ & I_{r-1} & & \vdots & & \mathbf{0} & \\ & & & \mu_{r-1,r} & & & \\ \hline 0 & \cdots & 0 & \mu_{rr} & 0 & \cdots & 0 \\ \hline & & & \mu_{r+1,r} & & & \\ & \mathbf{0} & & \vdots & & I_{n-r} & \\ & & & \mu_{nr} & & & \end{array}\right] \tag{42}$$

και τα μ_{ir} δίνονται από τον τύπο

$$\mu_{i1} = \begin{cases} \dfrac{1}{a_{rr}^{(r)}}, & i = r \\ -\dfrac{a_{ir}^{(r)}}{a_{rr}^{(r)}}, & i \neq r. \end{cases} \quad , a_{rr}^{(r)} \neq 0, \; r = 1, 2, \ldots, n.$$

Από την (41) προκύπτει το σύστημα

$$A^{(r+1)}x = b^{(r+1)} \tag{43}$$

με

$$A^{(r+1)} = \left[\begin{array}{c|c} I_r & * \\ \hline 0 & * \end{array}\right] \tag{44}$$

όπου $*$ συμβολίζει την ύπαρξη στοιχείων.

Έτσι η όλη διαδικασία μπορεί να περιγραφεί από τον πολλαπλασιασμό του αρχικού συστήματος με τον πίνακα

$$M = M^{(n)} M^{(n-1)} \dots M^{(2)} M^{(1)} \tag{45}$$

όπου $M^{(1)}$ και $M^{(i)}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1$ δίνονται από τις (37) και (42), αντίστοιχα ενώ

$$M^{(n)} = \left[\begin{array}{ccc|c} & & & \mu_{1,n} \\ & I_{n-1} & & \vdots \\ & & & \mu_{n-1,n} \\ \hline 0 & \cdots & 0 & \mu_{nn} \end{array}\right]. \tag{46}$$

΄ρα η

$$MA^{(1)}x = Mb^{(1)}$$

δίνει την

$$x = Mb^{(1)}. \tag{47}$$

Η μέθοδος απαλοιφής του Jordan

- Μερική ή ολική οδήγηση.
- Η επιλογή του οδηγού στοιχείου γίνεται όπως ακριβώς στη μέθοδο της απαλοιφής του Gauss και δεν επεκτείνεται στην αναζήτηση όλης της στήλης
- Υπολογισμός του αντιστρόφου ενός πίνακα
- Επίλυση συστημάτων με τον ίδιο πίνακα συντελεστών των αγνώστων.

Ο αλγόριθμος απαλοιφής του Jordan με μερική οδήγηση

1. Διάβασε τα δεδομένα n, $A = (a_{ij})$, $1 \leq i, j \leq n$ και $b = (b_i)$, $1 \leq i \leq n$.
2. Για $i = 1, 2, \ldots, n$ να τεθεί
$$a_{i,n+1} = b_i$$
3. Για $i = 1, 2, \ldots, n$ να τεθεί
$$h(i) = i$$
4. Για $r = 1, 2, \ldots, n$ να εκτελεσθούν τα βήματα 4.1-4.4 (διαδικασία απαλοιφής).
   4.1. Έστω p ο μικρότερος ακέραιος
   $$r \leq p \leq n$$
   και
   $$|a(h(p), r))| = \max_{r \leq j \leq n} |a(h(j), r)|$$
   4.2. Εάν $a(h(p), r) = 0$ τότε τύπωσε ``δεν υπάρχει μοναδική λύση''. Τέλος. (προσομοίωση της εναλλαγής των γραμμών)

4.3. Εάν $h(r) \neq h(p)$ τότε

$$\begin{aligned} q &= h(r) \\ h(r) &= h(p) \\ h(p) &= q \end{aligned}$$

4.4. Για $i = 1, 2, \ldots, n$ και $i \neq r$ να εκτελεσθούν τα βήματα 4.4.1 και 4.4.2

4.4.1. Να τεθεί

$$m(h(i), r) = -\frac{a(h(i), r)}{a(h(r), r)}$$

4.4.2. Για $j = r + 1, r + 2, \ldots, n + 1$ να τεθεί

$$a(h(i), j) = a(h(i), j) + m(h(i), r)a(h(r), j)$$

Επίλυση διαγώνιου συστήματος

5. Για $i = 1, 2, \ldots, n$ να τεθεί
   Εάν $a(h(i), i) = 0$ τότε τύπωσε ``όχι μοναδική λύση''. Τέλος.

$$x_i = a(h(i), n+1)/a(h(i), i)$$

6. Εκτύπωση της λύσης x_i, $i = 1, 2, \ldots, n$. Τέλος

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου του Jordan

$$\left[\begin{array}{ccc|cccc}
a_{11} & & & a_{1k} & a_{1,k+1} & \cdots & a_{1n} \\
& \hat{a}_{22} & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
& & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
& & & \hat{a}_{kk} & \hat{a}_{k,k+1} & \cdots & \hat{a}_{kn} \\
\cline{4-7}
& & & \hat{a}_{k+1,k} & \hat{a}_{k+1,k+1} & \cdots & \hat{a}_{k+1,n} \\
& & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
& & & \hat{a}_{nk} & \hat{a}_{n,k+1} & \cdots & \hat{a}_{nn}
\end{array}\right]
\underbrace{\begin{bmatrix} \\ X \\ \\ \end{bmatrix}}_{\ell}
=
\underbrace{\begin{bmatrix} \\ B \\ \\ \end{bmatrix}}_{\ell}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου του Jordan

Για τη διαγωνοποίηση του A απαιτούνται

$$\sum_{k=1}^{n}(n-1) \qquad \text{διαιρέσεις}$$

$$\sum_{k=1}^{n}(n-1)(n-k+\ell) \qquad \text{πολλαπλασιασμοί}$$

$$\sum_{k=1}^{n}(n-1)(n-k+\ell) \qquad \text{προσθαφαιρέσεις}$$

ή τελικά βρίσκουμε ότι χρειάζονται

$$n(n-1) \qquad \text{διαιρέσεις}$$

$$\frac{n(n-1)(n-1+2\ell)}{2} \qquad \text{πολλαπλασιασμοί}$$

$$\frac{n(n-1)(n-1+2\ell)}{2} \qquad \text{προσθαφαιρέσεις.}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου του Jordan

Αν τώρα προστεθούν και οι n διαιρέσεις για την εύρεση μιας λύσης τότε για τα ℓ συστήματα απαιτούνται $n\ell$ διαιρέσεις.

΄ρα τελικά για τη λύση ℓ συστημάτων με τη μέθοδο απαλοιφής του Jordan απαιτούνται

$$\begin{aligned} &n(n-1+\ell) && \text{διαιρέσεις} \\ &\frac{n(n-1)(n-1+2\ell)}{2} && \text{πολλαπλασιασμοί} \\ &\frac{n(n-1)(n-1+2\ell)}{2} && \text{προσθαφαιρέσεις.} \end{aligned} \tag{48}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου του Jordan

Για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος οι ανωτέρω τύποι δίνουν ($\ell = 1$)

$$\begin{aligned} & n^2 && \text{διαιρέσεις} \\ & \frac{n^3}{2} - \frac{n}{2} && \text{πολλαπλασιασμοί} \\ & \frac{n^3}{2} + \frac{n}{2} && \text{προσθαφαιρέσεις,} \end{aligned} \tag{49}$$

ενώ για τον υπολογισμό του αντιστρόφου ($\ell = n$) δίνουν

$$\begin{aligned} & 2n^2 - n && \text{διαιρέσεις} \\ & \frac{3n^3}{2} - 2n^2 + \frac{n}{2} && \text{πολλαπλασιασμοί} \\ & \frac{3n^3}{2} - 2n^2 + \frac{n}{2} && \text{προσθαφαιρέσεις.} \end{aligned} \tag{50}$$

Υπολογιστική πολυπλοκότητα της μεθόδου του Jordan

- Το πλήθος των πράξεων για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος με τη μέθοδο του Jordan είναι της τάξης $O(n^3/2)$
- Για τον υπολογισμό του αντιστρόφου οι δύο μέθοδοι απαιτούν τον ίδιο ακριβώς πλήθος πράξεων.
- Η μέθοδος του Jordan χρησιμοποιείται μόνον για τον υπολογισμό του αντιστρόφου ενός πίνακα.
- Η μέθοδος Simplex βασίζεται στη μέθοδο του Jordan.

Η LU μέθοδος

Στη μέθοδο απαλοιφής του Gauss χωρίς οδήγηση, όπου το σύστημα $A^{(1)}x = b^{(1)}$ μετασχηματίζεται στο τριγωνικό σύστημα

$$MA^{(1)}x = Mb^{(1)}$$

ή στο

$$A^{(n)}x = b^{(n)}$$

οπότε παρατηρούμε ότι

$$A^{(1)} = M^{-1}A^{(n)} \tag{51}$$

όπου λόγω της (45)

$$M^{-1} = \left[M^{(1)}\right]^{-1}\left[M^{(2)}\right]^{-1}\dots\left[M^{(n-1)}\right]^{-1} \tag{52}$$

και

$$\left[M^{(r)}\right]^{-1} = \left[\begin{array}{c|ccccc} I_{r-1} & & & \mathbf{0} & & \\ \hline & 1 & & & & \\ & -m_{r+1,r} & 1 & & \mathbf{0} & \\ \mathbf{0} & -m_{r+2,r} & 0 & 1 & & \\ & \vdots & \vdots & & \ddots & \\ & -m_{nr} & 0 & \cdots & 0 & 1 \end{array}\right]. \tag{53}$$

Με απλούς πολλαπλασιασμούς προκύπτει ότι

$$M^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ -m_{21} & 1 & & & 0 & \\ -m_{31} & -m_{32} & 1 & & & \\ -m_{41} & -m_{42} & -m_{43} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ -m_{n1} & -m_{n2} & -m_{n3} & -m_{n4} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{54}$$

και συνεπώς ο M^{-1} είναι ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας.

Επειδή ο $A^{(n)}$ είναι ένας άνω τριγωνικός πίνακας, η (51) δηλώνει ότι αν κανένα από τα οδηγά στοιχεία δεν μηδενίζεται, κατά τη διάρκεια του σχηματισμού του $A^{(n)}$ από τον $A^{(1)}$, τότε ο $A^{(1)}$ μπορεί να διασπασθεί σε ένα γινόμενο ενός μοναδιαίου κάτω τριγωνικού πίνακα M^{-1} και ενός άνω τριγωνικού πίνακα $A^{(n)}$. Το επόμενο θεώρημα δίνει ικανές συνθήκες για την ύπαρξη μιας τέτοιας διάσπασης.

Θεώρημα 3.3.1 (Τριγωνικής Διαχώρισης LU)

Ένας $n \times n$ πίνακας $A = (a_{ij})$ μπορεί να γραφεί σαν το γινόμενο LU, όπου L είναι κάτω τριγωνικός πίνακας και U άνω τριγωνικός πίνακας, αν

$$\det [a_{11}] \neq 0, \quad \det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \neq 0, \ldots, \det A \neq 0.$$

Επιπλέον, η τριγωνική αυτή διαχώριση είναι μοναδική αν τα διαγώνια στοιχεία είτε του L ή του U είναι ορισμένα.

Απόδειξη

Ας υποθέσουμε ότι ο A μπορεί να γραφεί σαν το γινόμενο

$$A = LU \tag{55}$$

όπου ο πίνακας L είναι ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας, τότε θα έχουμε

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ \ell_{21} & 1 & & \mathbf{0} & \\ \ell_{31} & \ell_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \ell_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ & \mathbf{0} & & \ddots & \vdots \\ & & & & u_{nn} \end{bmatrix}. \tag{56}$$

Εάν εκτελέσουμε τον πολλαπλασιασμό των πινάκων στο δεξί μέλος και εξισώσουμε με τα αντίστοιχα στοιχεία του A, θα λάβουμε n^2 μη γραμμικές εξισώσεις με n^2 αγνώστους. Είναι φανερό λοιπόν ότι αν τα διαγώνια στοιχεία του L δεν ήσαν ορισμένα (στην προκειμένη περίπτωση =1), τότε θα είχαμε n επιπλέον αγνώστους και η διαχώριση αυτή δε θα ήταν μοναδική.

Προσδιορισμός των στοιχείων των πινάκων L και U

- Υπολογισμός της 1ης γραμμής του U

Αν υπολογίσουμε τα στοιχεία της *πρώτης γραμμής* του γινομένου LU και τα εξισώσουμε με τα στοιχεία της πρώτης γραμμής του A λαμβάνουμε τις εξισώσεις

$$\begin{aligned} u_{11} &= a_{11} \\ u_{12} &= a_{12} \\ &\vdots \\ u_{1n} &= a_{1n} \end{aligned} \tag{57}$$

οι οποίες δηλώνουν ότι οι *πρώτες γραμμές των A και U ταυτίζονται.*

- Υπολογισμός της 1ης στήλης του L

Όμοια, αν υπολογίσουμε τα στοιχεία της *πρώτης στήλης* του LU κάτω από την κύρια διαγώνιο, λαμβάνουμε τις εξισώσεις

$$\begin{aligned} \ell_{21}u_{11} &= a_{21} \\ \ell_{31}u_{11} &= a_{31} \\ &\vdots \\ \ell_{n1}u_{11} &= a_{n1}. \end{aligned} \tag{58}$$

Επειδή $u_{11} = a_{11}$, αν $a_{11} \neq 0$, τότε οι (58) μας δίνουν αμέσως τα στοιχεία της *πρώτης στήλης* του L.

r βήμα της μεθόδου LU

Γενικά, ας υποθέσουμε ότι θέλουμε να υπολογίσουμε τα στοιχεία της r γραμμής του U και στη συνέχεια τα στοιχεία της r στήλης του L, υποθέτοντας ότι τα στοιχεία των $k = 1, 2, \ldots, r - 1$ γραμμών και στηλών του U και L, αντίστοιχα, έχουν προηγουμένως προσδιορισθεί. Σχηματικά η όλη κατάσταση μπορεί να περιγραφεί ως ακολούθως

$$
\left[\begin{array}{ccccc}
1 & & & & \\
\ell_{21} & \ddots & & & 0 \\
\vdots & & & & \\
\ell_{r1} & \cdots & 1 & & \\
\hline
\ell_{r+1,1} & \cdots & \boxed{\ell_{r+1,r}} & 1 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
\ell_{n1} & \cdots & \boxed{\ell_{nr}} & \cdots & 1
\end{array}\right]
\left[\begin{array}{cccccc}
u_{11} & \cdots & u_{1r} & u_{1,r+1} & \cdots & u_{1n} \\
 & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & u_{r-1,r} & u_{r-1,r+1} & \cdots & u_{r-1,n} \\
\hline
 & & \boxed{u_{rr}} & \boxed{u_{r,r+1}} & \cdots & \boxed{u_{rn}} \\
 & 0 & & \ddots & & \vdots \\
 & & & & & u_{nn}
\end{array}\right]
$$

Υπολογισμός των στοιχείων της r γραμμής του U

Εκτελώντας τον πολλαπλασιασμό της r γραμμής του L διαδοχικά με την $r, r+1, \ldots, n$ στήλη του U και εξισώνοντας με τα αντίστοιχα στοιχεία του A, λαμβάνουμε

$$\sum_{j=1}^{r-1} \ell_{rj} u_{jr} + u_{rr} = a_{rr}$$

$$\begin{array}{cccccc} \displaystyle\sum_{j=1}^{r-1} \ell_{rj} u_{j,r+1} & + & u_{r,r+1} & = & a_{r,r+1} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \displaystyle\sum_{j=1}^{r-1} \ell_{rj} u_{jn} & + & u_{rn} & = & a_{rn}. \end{array}$$

Οι άγνωστοι στις ανωτέρω εξισώσεις είναι οι $u_{rp},\ p = r, r+1, \ldots, n$ οπότε έχουμε

$$u_{rp} = a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} \ell_{rj} u_{jp}, \quad p = r, r+1, \ldots, n. \tag{59}$$

Υπολογισμός των στοιχείων της r στήλης του L

Όμοια, εκτελώντας τον πολλαπλασιασμό της r στήλης του U με τις $r+1, r+2, \ldots, n$ γραμμές του L και εξισώνοντας με τα αντίστοιχα στοιχεία του A λαμβάνουμε

$$\sum_{j=1}^{r-1} \ell_{r+1,j} u_{jr} + \ell_{r+1,r} u_{rr} = a_{r+1,r}$$

$$\begin{array}{ccccc} \sum_{j=1}^{r-1} \ell_{r+2,j} u_{jr} & + & \ell_{r+2,r} u_{rr} & = & a_{r+2,r} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \sum_{j=1}^{r-1} \ell_{nj} u_{jr} & + & \ell_{nr} u_{rr} & = & a_{nr}. \end{array}$$

Οι άγνωστοι τώρα είναι οι ℓ_{pr}, $r+1, r+2, \ldots, n$ οπότε από τις ανωτέρω εξισώσεις έχουμε, αν $u_{rr} \neq 0$,

$$\ell_{pr} = \frac{1}{u_{rr}} \left(a_{pr} - \sum_{j=1}^{r-1} \ell_{pj} u_{jr} \right), \quad p = r+1, r+2, \ldots, n \tag{60}$$

Επιπλέον, από την (59) παρατηρούμε ότι για $p = r$ έχουμε

$$u_{rr} = a_{rr} - \sum_{j=1}^{r-1} \ell_{rj} u_{jr}, \quad r = 1, 2, \ldots, n$$

και αν $r = 2$ λαμβάνουμε διαδοχικά

$$\begin{aligned} u_{22} &= a_{22} - \ell_{21} u_{12} \\ &= a_{22} - \tfrac{a_{21}}{a_{11}} a_{12} \left(= a_{22}^{(2)} \right) \end{aligned}$$

ή τελικά

$$u_{22} = \frac{1}{a_{11}} \det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}.$$

Αλλά από την υπόθεση έχουμε ότι $a_{11} \neq 0$ και $\det \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix} \neq 0$, άρα $u_{22} \neq 0$. Εάν λοιπόν ισχύουν οι συνθήκες της υπόθεσης, τότε $u_{rr} \neq 0$, $r = 1, 2, \ldots, n$.

Επειδή η τριγωνική διαχώριση είναι μοναδική όταν ο L είναι μοναδιαίος κάτω τριγωνικός τότε

$$A^{(1)} = LU$$

με

$$M^{-1} = L \quad \text{και} \quad A^{(n)} = U.$$

Με άλλα λόγια η μέθοδος απαλοιφής του Gauss χωρίς οδήγηση είναι μαθηματικά ίδια με την τριγωνική διαχώριση LU με L μοναδιαίο κάτω τριγωνικό πίνακα.

Ο Wilkinson αποδεικνύει ότι οι δύο μέθοδοι δεν δίνουν μόνο τα ίδια μαθηματικά αποτελέσματα αλλά, αν οι υπολογισμοί και στις δύο διαδικασίες γίνουν σε ένα υπολογιστή με την αριθμητική της κινητής υποδιαστολής, τότε ακόμα και τα σφάλματα στρογγύλευσης είναι τα ίδια.

Επίσης, τυχόν αποτυχία της τριγωνικής διαχώρισης λαμβάνει χώρα στις ίδιες περιπτώσεις με τη μέθοδο απαλοιφής του Gauss χωρίς οδήγηση.

Σύγκριση των μεθόδων Gauss και LU

Υπάρχει ένα ουσιαστικό πλεονέκτημα της τριγωνικής διαχώρισης σε σχέση με τη μέθοδο απαλοιφής του Gauss για τους υπολογιστές εκείνους(στους διανυσματικούς επεξεργαστές) που διαθέτουν τη δυνατότητα της καταχώρησης υπολογισμών της μορφής $\sum_{j=1}^{n} a_j b_j$ σε διπλού μήκους λέξεις . Με τη δυνατότητα αυτή δεν απαιτείται επιπλέον χρόνος για να εργασθεί κανείς με διπλού μήκους λέξεις, πράγμα που σημαίνει μεγαλύτερη ακρίβεια στους υπολογισμούς.

Επειδή η μέθοδος της απαλοιφής του Gauss δεν παρουσιάζει υπολογισμούς της μορφής αθροισμάτων γινομένων, γιαυτό θα πρέπει να προτιμάται η τριγωνική διαχώριση, όπου είναι διαθέσιμη η ανωτέρω δυνατότητα.

Παρατηρήσεις

1. Δεν χρειάζεται μερική οδήγηση για τις ακόλουθες κλάσεις πινάκων
   - για τους πίνακες, οι οποίοι είναι πραγματικοί, συμμετρικοί και θετικά ορισμένοι και
   - για τους μη ιδιάζοντες πίνακες πίνακες, οι οποίοι είναι διαγώνια υπέρτεροι, δηλαδή για τους οποίους ισχύει

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{61}$$

2. Ας υποθέσουμε ότι ο A μπορεί να διαχωρισθεί ως

$$A = LU$$

τότε στην περίπτωση που έχουμε να λύσουμε ένα γραμμικό σύστημα $Ax = b$ λαμβάνουμε

$$LUx = b \tag{62}$$

ή ισοδύναμα τα δύο τριγωνικά συστήματα

$$Ly = b, \quad Ux = y. \tag{63}$$

Επίλυση των 2 τριγωνικών συστημάτων

Η λύση του κάτω τριγωνικού συστήματος (63) δίνεται από τους τύπους ($\ell_{ii} = 1, i = 1, 2, \ldots, n$)

$$y_1 = b_1$$

και

$$y_i = b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij} y_j, \quad i = 2, 3, \ldots, n \tag{65}$$

ενώ η λύση του (64) από τους

$$x_n = y_n / u_{nn}$$

και

$$x_i = \left(y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j \right) / u_{ii}, \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1.$$

3. Χρησιμοποιώντας την LU μέθοδο παρατηρούμε ότι τα στοιχεία των L και U υπολογίζονται αμέσως, χωρίς ενδιάμεσους υπολογισμούς όπως αυτό είναι αναγκαίο με την χρησιμοποίηση της μεθόδου απαλοιφής του Gauss. Επίσης, τόσο τα στοιχεία του L όσο και του U αποθηκεύονται στα στοιχεία του A χωρίς αυτό να προκαλεί καμία ανωμαλία. Στο τέλος δηλαδή της τριγωνικής διαχώρισης θα έχουμε, αντί του πίνακα $A = (a_{ij})$, τον ακόλουθο πίνακα για $n = 4$

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ \ell_{21} & u_{22} & u_{23} & u_{24} \\ \ell_{31} & \ell_{32} & u_{33} & u_{34} \\ \ell_{41} & \ell_{42} & \ell_{43} & u_{44} \end{bmatrix}.$$

Τέλος, ας σημειωθεί ότι η τριγωνική διαχώριση για την οποία ο L είναι ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας είναι γνωστή σαν μέθοδος του Doolittle, ενώ στην περίπτωση όπου ο U είναι μοναδιαίος άνω τριγωνικός είναι γνωστή σαν η μέθοδος του Crout.

Ο Αλγόριθμος της LU μεθόδου

1. Διάβασε τα δεδομένα: την τάξη n, τα στοιχεία a_{ij}, $1 \leq i, j \leq n$ του A και τα στοιχεία l_{ii}, $1 \leq i \leq n$ του L ή τα στοιχεία u_{ii}, $1 \leq i \leq n$ του U.
2. Να επιλεγούν l_{11} και u_{11} τέτοια ώστε να ικανοποιείται η $l_{11} u_{11} = a_{11}$. Αν $l_{11} u_{11} = 0$ τότε τύπωσε ``παραγοντοποίηση αδύνατος''. Τέλος.
3. Για $j = 2, 3, \ldots, n$ να τεθεί

$$u_{1j} = a_{1j}/l_{11} (\text{ πρώτη γραμμή του } U)$$
$$l_{j1} = a_{j1}/u_{11} (\text{ πρώτη γραμμή του } L)$$

4. Για $r = 2, 3, \dots, n-1$ να εκτελεστούν τα βήματα 4.1-4.2

   4.1 Να επιλεγούν l_{rr} και u_{rr} ώστε να ικανοποιείται η

$$l_{rr}\, u_{rr} = a_{rr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, u_{jr}$$

   Αν $l_{rr}\, u_{rr} = 0$ τότε τύπωσε ``παραγοντοποίηση αδύνατος''.

   4.2 Για $p = r+1, r+2, \dots, n$ να τεθεί

$$u_{rp} = \left(a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, u_{jp} \right) / \, l_{rr} \quad (\, r \text{ γραμμή του } U)$$

   και

$$l_{pr} = \left(a_{pr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{pj}\, u_{jr} \right) / \, u_{rr} \quad (\, r \text{ γραμμή του } L)$$

5. Να επιλεγούν u_{nn} και l_{nn} ώστε να ικανοποιείται η

$$u_{nn}\, l_{nn} = a_{nn} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{nj}\, u_{jn}$$

(Παρατηρούμε ότι αν $l_{nn} u_{nn} = 0,$ τότε $A = LU$ αλλά ο A θα είναι ένας ιδιάζων πίνακας)

6. Εκτύπωση των $l_{ij},\ 1 \leq j \leq i,\ 1 \leq i \leq n$
   Εκτύπωση των $u_{ij},\ i \leq j \leq n,\ 1 \leq i \leq n$
   Τέλος

Παρατήρηση

Υπάρχουν όμως και άλλοι τρόποι υπολογισμού των στοιχείων των L και U. Αν φανταστούμε ότι τα στοιχεία των πινάκων αυτών είναι τοποθετημένα σε ένα πίνακα ως εξής:

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

τότε είναι δυνατόν να υπολογίσουμε τα στοιχεία του παραπάνω πίνακα κατά γραμμές, ξεκινώντας από την πρώτη, δεύτερη, τρίτη κ.ο.κ.

Μέθοδος *LU* κατά γραμμές

1ο βήμα

Πράγματι, έχουμε ότι

$$u_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1, 2, \ldots, n.$$

r βήμα

Αν τώρα υποθέσουμε ότι βρισκόμαστε στον υπολογισμό της r γραμμής του παραπάνω πίνακα, δηλαδή έχουμε

$$\left[\begin{array}{cccccccc}
1 & & & & & & & \\
l_{21} & 1 & & & & 0 & & \\
l_{31} & l_{32} & 1 & & & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & & & \\
\hline
l_{r1} & l_{r2} & l_{r3} & \ldots & l_{r,r-1} & 1 & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \ddots & \\
l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \ldots & l_{n,r-1} & \ldots & l_{n,n-1} & 1
\end{array}\right]
\left[\begin{array}{cccccc}
u_{11} & u_{12} & \ldots & u_{1r} & \ldots & u_{1n} \\
 & u_{22} & \ldots & u_{2r} & \ldots & u_{2n} \\
0 & & \ddots & \vdots & & \vdots \\
\hline
 & & & u_{rr} & \ldots & u_{rn} \\
 & 0 & & & \ddots & \vdots \\
 & & & & & u_{nn}
\end{array}\right]$$

όπου τα στοιχεία πάνω από την οριζόντιο γραμμή έχουν ήδη υπολογισθεί, τότε τα στοιχεία της r γραμμής του L υπολογίζονται από την λύση του συστήματος

$$\begin{array}{ccccccccccc}
l_{r1}u_{11} & & & & & & & & & = & a_{r1} \\
l_{r1}u_{12} & + & l_{r2}u_{22} & & & & & & & = & a_{r2} \\
l_{r1}u_{13} & + & l_{r2}u_{23} & + & l_{r3}u_{33} & & & & & = & a_{r3} \\
\vdots & & \vdots & & \vdots & & & & & & \vdots \\
l_{r1}u_{1r} & + & l_{r2}u_{2r} & + & l_{r3}u_{3r} & + & \ldots & + & l_{r,r-1}u_{r-1,r-1} & = & a_{r,r-1}
\end{array}$$

ή του

$$\begin{bmatrix} u_{11} & & & & 0 \\ u_{12} & u_{22} & & & \\ u_{13} & u_{23} & u_{33} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ u_{1,r-1} & u_{2,r-1} & u_{3,r-1} & \ldots & u_{r-1,r-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{r1} \\ l_{r2} \\ l_{r3} \\ \vdots \\ l_{r,r-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{r1} \\ a_{r2} \\ a_{r3} \\ \vdots \\ a_{r,r-1} \end{bmatrix}$$

ενώ τα στοιχεία της r γραμμής του U υπολογίζονται από τις σχέσεις

$$u_{rp} = a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, u_{jp}, \quad p = r, r+1, \ldots, n.$$

Μέθοδος *LU* κατά στήλες

Με ανάλογο τρόπο μπορούμε να υπολογίσουμε τα στοιχεία των L και U κατά στήλες. Εργαζόμενοι ανάλογα έχουμε για

$$L = \left[\begin{array}{ccccc|ccc}
1 & & & & & & & \\
l_{21} & 1 & & & & & & \\
l_{31} & l_{32} & 1 & & & & 0 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & & & \\
l_{r1} & l_{r2} & l_{r3} & \cdots & l_{r,r-1} & 1 & & \\
l_{r+1,1} & l_{r+1,2} & l_{r+1,3} & \cdots & l_{r+1,r-1} & l_{r+1,r} & 1 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \\
l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{n,r-1} & l_{n,r} & \cdots & 1
\end{array}\right]$$

και

$$U = \left[\begin{array}{ccc|ccc}
u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1r} & \cdots & u_{1n} \\
 & u_{22} & \cdots & u_{2r} & \cdots & u_{2n} \\
 & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
 & & & & & \\
 & & & u_{rr} & \cdots & u_{rn} \\
 & \text{0} & & & \ddots & \vdots \\
 & & & & & u_{nn}
\end{array}\right].$$

Από την $LU = A$ προκύπτει το σύστημα

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
u_{1r} & & & & & & & & & = & a_{1r} \\
l_{21}u_{1r} & + & u_{2r} & & & & & & & = & a_{2r} \\
\vdots & & \vdots & & & & & & & & \vdots \\
l_{r1}u_{1r} & + & l_{r2}u_{2r} & + & \ldots & + & l_{r,r-1}u_{r-1,r} & + & u_{rr} & = & a_{rr}
\end{array}
$$

ή

$$
\begin{bmatrix}
1 & & & & & \\
l_{21} & 1 & & & \mathbf{0} & \\
l_{31} & l_{32} & 1 & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & \\
l_{r1} & l_{r2} & l_{r3} & \ldots & l_{r,r-1} & 1
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} u_{1r} \\ u_{2r} \\ u_{3r} \\ \vdots \\ u_{rr} \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} a_{1r} \\ a_{2r} \\ a_{3r} \\ \vdots \\ a_{rr} \end{bmatrix}
$$

όπου ο υπολογισμός της r στήλης του L γίνεται από τις σχέσεις

$$
l_{pr} = \left(a_{pr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{pj}\, u_{jr} \right) \Big/ \, u_{rr}, \quad p = r+1, r+2, \ldots, n.
$$

Παραλλαγές της LU μεθόδου

Γενικά η LU παραγοντοποίηση του A δεν είναι μοναδική. Αν $A = LU$ είναι μια LU παραγοντοποίηση του A και D είναι ένας μη ιδιάζων διαγώνιος πίνακας τότε $L' = LD$ είναι ένας κάτω τριγωνικός και $U' = D^{-1}U$ είναι ένας άνω τριγωνικός πίνακας, άρα

$$A = LU = LDD^{-1}U = L'U'$$

και $L'U'$ είναι επίσης μια LU παραγοντοποίηση του A. Το παράδειγμα αυτό δείχνει τη δυνατότητα κανονικοποίησης των LU παραγοντοποιήσεων ενός πίνακα με την εισαγωγή ενός διαγωνίου πίνακα.

Ορισμός

Θα λέμε ότι

$$A = LDU$$

είναι μια LDU παραγοντοποίηση του A αν ο L είναι μοναδιαίος κάτω τριγωνικός, ο D είναι διαγώνιος και ο U είναι μοναδιαίος άνω τριγωνικός.

Θεώρημα 2.4.1

Ο μη ιδιάζων πίνακας A έχει μια μοναδική LDU παραγοντοποίηση αν και μόνο αν οι υποπίνακες $A^{[r]}$, $r = 1, 2, \ldots, n-1$ όπου

$$A^{[r]} = \begin{bmatrix} a_{11} & \ldots & a_{1r} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{r1} & \ldots & a_{rr} \end{bmatrix}$$

είναι αντιστρέψιμοι.

Απόδειξη

Πρώτα αποδεικνύεται ότι αν ο A έχει μια LDU παραγοντοποίηση τότε αυτή είναι μοναδική. Έστω $A = L_1 D_1 U_1$ και $A = L_2 D_2 U_2$. Επειδή ο A είναι μη ιδιάζων, το ίδιο είναι και οι D_1 και D_2. Από την εξίσωση

$$L_1 D_1 U_1 = L_2 D_2 U_2$$

έχουμε

$$L_2^{-1} L_1 = D_2 U_2 U_1^{-1} D_1^{-1}. \tag{66}$$

Το αριστερό μέλος της (66) είναι ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας και το δεξί μέλος είναι ένας άνω τριγωνικός πίνακας. Συνεπώς και τα δύο μέλη είναι ένας ταυτοτικός πίνακας, πράγμα που σημαίνει

$$L_2^{-1} L_1 = I$$

και

$$L_1 = L_2.$$

Όμοια μπορεί να δειχθεί ότι

$$U_1 = U_2.$$

Τέλος επειδή οι L_1 και U_1 είναι μη ιδιάζοντες, η $L_1 D_1 U_1 = L_2 D_2 U_2$ δηλώνει ότι

$$D_1 = D_2.$$

Απομένει λοιπόν να αποδειχθεί ότι ο A έχει μια LDU παραγοντοποίηση αν και μόνο αν οι $A^{[1]} \ldots A^{[n-1]}$ είναι μη ιδιάζοντες.
Πρώτα υποθέτουμε ότι $A = LDU$ είναι μια LDU παραγοντοποίηση του A. Τότε οι L, D και U είναι μη ιδιάζοντες. Επειδή οι L και U είναι τριγωνικοί και ο D είναι διαγώνιος έπεται ότι οι $L^{[k]}$, $D^{[k]}$ και $U^{[k]}$ είναι μη ιδιάζοντες. ΄λλά $A^{[k]} = L^{[k]} D^{[k]} U^{[k]}$ άρα ο $A^{[k]}$ είναι μη ιδιάζων.

Αντίστροφα

ας υποθέσουμε ότι οι $A^{[r]}$, $r = 1, 2, \ldots, n-1$ είναι μη ιδιάζοντες. Τότε από το Θεώρημα 3.3.1 και την παρατήρηση μπορεί να εφαρμοστεί η μεθοδος της απαλοιφής του Gauss και να λάβουμε $A = LA^{(n)}$ όπου L και $A^{(n)}$ δίνονται από τις (54) και (51) αντίστοιχα. Τα διαγώνια στοιχεία του $A^{(n)}$ είναι τώρα τα οδηγά στοιχεία $a_{kk}^{(k)}$, $k = 1, 2, \ldots, n$ τα οποία είναι διάφορα του μηδενός. Έστω $D = diag\left(a_{11}^{(1)}, a_{22}^{(2)}, \ldots, a_{nn}^{(n)}\right)$ και $U = D^{-1}A^{(n)}$, τότε η

$$A = LDU$$

είναι μια παραγοντοποίηση LDU του A.

Από την απόδειξη του παραπάνω θεωρήματος είναι φανερό ότι αν υπάρχει μια LDU παραγοντοποίηση του A τότε

$$
\begin{aligned}
l_{ij} &= -m_{ij}, \quad i = 2, 3, \ldots, n, \quad j = 1, 2, \ldots, i-1 \\
d_{ii} &= a_{ii}^{(i)}, \qquad i = 1, 2, \ldots, n
\end{aligned}
$$

και

$$
u_{ij} = \frac{a_{ij}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}, \quad i = 1, 2, \ldots, n, \; j = i+1, i+2, \ldots, n.
$$

Πιο συγκεκριμένα υπάρχουν τρεις σημαντικές παραλλαγές μιας LDU παραγοντοποίησης. Η πρώτη είναι η

$$
A = (LD)U = L'U
$$

οπότε η διαχώριση είναι η

$$\begin{bmatrix} l'_{11} & & & 0 \\ l'_{21} & l'_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l'_{n1} & l'_{n2} & \dots & l'_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{11} & \dots & u_{nn} \\ & 1 & \dots & u_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix} = L'U$$

όπου

$$l'_{ii} = d_{ii},\ i = 1, 2, \dots, n,\ l'_{ij} = l_{ij} d_{ii},\ i = 2, 3, \dots, n,\ j = 1, 2, \dots, i-1$$

και η οποία είναι η Crout παραγοντοποίηση.

Συγκρίνοντας τα στοιχεία στην εξίσωση πινάκων $A = LDU$, όπως στο Θεώρημα 3.3.1 προκύπτει

$$A = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & & \\ l_{21} & 1 & & & & \mathbf{0} & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & & & \\ l_{r1} & l_{r2} & l_{r3} & \dots & l_{r,r-1} & 1 & & \\ l_{r+1,1} & l_{r+1,2} & l_{r+1,3} & \dots & l_{r+1,r-1} & l_{r+1,r} \, 1 & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & l_{n,r-1} & l_{n,r} & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} d_{11} & & & \mathbf{0} \\ & d_{22} & & \\ & & \ddots & \\ \mathbf{0} & & & d_{nn} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \dots & u_{1r} & u_{1,r+1} & \dots & u_{1n} \\ & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & 1 & u_{r,r+1} & \dots & u_{rn} \\ & & & & 1 & \dots & u_{r+1,n} \\ & & \mathbf{0} & & & \ddots & \vdots \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

ή

$$
A = \left[\begin{array}{ccccc|ccc}
1 & & & & & & & \\
l_{21} & 1 & & & & & & \\
l_{31} & l_{32} & 1 & & & \mathbf{0} & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \ddots & & & \\
l_{r1} & l_{r2} & l_{r3} & \dots & l_{r,r-1} & 1 & & \\
\hline
l_{r+1,1} & l_{r+1,2} & l_{r+1,3} & \dots & l_{r+1,r-1} & \boxed{l_{r+1,r}} & 1 & \\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \\
l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & l_{n,r-1} & \boxed{l_{n,r}} & \dots & 1
\end{array}\right]
$$

$$
\left[\begin{array}{ccccccc}
d_{11} & d_{11}u_{12} & \dots & d_{11}u_{1r} & d_{11}u_{1,r-1} & \dots & d_{11}u_{1n} \\
 & \ddots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 & & & \boxed{d_{rr}} & d_{rr}u_{r,r+1} & \dots & d_{rr}u_{rn} \\
 & & & & \ddots & & \vdots \\
 & \mathbf{0} & & & & \ddots & \vdots
\end{array}\right.
$$

ή τελικά

$$\begin{aligned} d_{11} &= a_{11} \\ d_{11} u_{12} &= a_{12} \\ \vdots \quad & \quad \vdots \\ d_{11} u_{1n} &= a_{1n} \end{aligned}$$

οπότε

$$d_{11} = a_{11}$$

και

$$u_{ij} = \frac{a_{ij}}{d_{11}}, \quad j = 2, 3, \ldots, n.$$

Επίσης

$$\begin{aligned} l_{21} d_{11} &= a_{21} \\ &\vdots \\ l_{n1} d_{11} &= a_{n1} \end{aligned}$$

άρα

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}}{d_{11}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n.$$

Γενικά λοιπόν έχουμε

$$a_{rr} = \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, d_{jj}\, u_{jr} + d_{rr}, \quad r = 2, 3, \ldots, n.$$

Επίσης

$$\begin{aligned} a_{rp} &= \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, d_{jj}\, u_{jp} + d_{rr}\, u_{rp}, \qquad p = r+1, r+2, \ldots, n \\ a_{pr} &= \sum_{j=1}^{r-1} l_{pr}\, d_{jj}\, u_{jr} + l_{pr}\, d_{rr}, \qquad p = r+1, r+2, \ldots, n. \end{aligned}$$

Συνοψίζοντας, για τον υπολογισμό των L, D και U έχουμε

$$\left.\begin{aligned} d_{rr} &= a_{rr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, d_{jj}\, u_{jr} \\ u_{rp} &= \left(a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, d_{jj}\, u_{jp} \right) \Big/ d_{rr} \\ l_{rp} &= \left(a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{pj}\, d_{jj}\, u_{jr} \right) \Big/ d_{rr} \end{aligned}\right\} p = r+1, r+2, \ldots, n, \quad r = 1, 2, \ldots, n.$$

Η δεύτερη παραλλαγή

είναι η

$$A = L(DU) = LU'$$

οπότε η διαχώρηση είναι η

$$\begin{bmatrix} 1 & & 0 & \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & \dots & & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u'_{11} & \dots & \dots & u'_{1n} \\ & \ddots & & \vdots \\ & & \ddots & \vdots \\ 0 & & & u'_{nn} \end{bmatrix} = LU'$$

όπου

$$u'_{ii} = d_{ii},\ i = 1, 2, \dots, n \text{ και } u'_{ij} = d_i\, u_{ij} = a_{ij}^{(i)}, \quad \begin{aligned} i &= 1, 2, \dots, n, \\ j &= 1, 2, \dots, n \end{aligned}$$

η οποία είναι γνωστή σαν η Doolittle παραγοντοποίηση.

A συμμετρικός

Όταν ο A είναι συμμετρικός τότε η LU παραγοντοποίηση καταστρέφει τη συμμετρία $(L \neq U^T)$. Στη περίπτωση αυτή θεωρούμε τη μορφή

$$A = LDL^T \tag{67}$$

όπου L είναι ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας. Αν τα διαγώνια στοιχεία του D είναι θετικά τότε μπορούμε να σχηματίσουμε τον πίνακα

$$D^{1/2} = diag(d_{11}^{1/2}, \ldots, d_{nn}^{1/2}) \tag{68}$$

οπότε ο A μπορεί να γραφεί σαν

$$A = LDL^T = (LD^{1/2})(LD^{1/2})^T = \overline{L}\overline{L}^T \tag{69}$$

όπου

$$\overline{L} = LD^{1/2}. \tag{70}$$

Συνεπώς ο A μπορεί να γραφεί σαν

$$A = LL^T.$$

Η παραγοντοποίηση αυτή είναι γνωστή σαν η μέθοδος του Choleski και εφαρμόζεται στους συμμετρικούς και θετικά ορισμένους πίνακες καθόσο για τους πίνακες αυτούς υπάρχει πάντα μια Choleski παραγοντοποίηση.

Ορισμός

Ένας συμμετρικός πίνακας A είναι **θετικά ορισμένος** αν για $x \neq 0$ συνεπάγεται

$$x^T Ax > 0$$

και θετικά ημιορισμένος αν

$$x^T Ax \geq 0.$$

Παράδειγμα

Έστω ότι ο A είναι ένας $m \times n$ πίνακας, τότε ο πίνακας $B = A^T A$ είναι συμμετρικός, πράγματι

$$B^T = (A^T A)^T = A^T A = B.$$

Επίσης ο B είναι θετικά ημιορισμένος. Πράγματι, έστω $x \neq 0$ και $y = Ax$, τότε

$$x^T Bx = x^T A^T Ax = y^T y = \sum_{i=1}^{n} y_i^2 \geq 0.$$

Αν επιπλέον ο βαθμός (rank) του A είναι n, τότε για $x \neq 0$ και $y = Ax \neq 0$, οπότε $x^T Bx > 0$ άρα ο B είναι θετικά ορισμένος.

Θεώρημα 2.4.2

Αν ο A είναι n $\times$ n θετικά ορισμένος πίνακας τότε ο A είναι μη ιδιάζων.

Απόδειξη

Αν $x \neq 0$ είναι ένα διάνυσμα για το οποίο $Ax = 0$ τότε

$$x^T Ax = 0$$

πράγμα που είναι αντίθετο με την υπόθεση ότι ο A είναι θετικά ορισμένος. Συνεπώς το $Ax = 0$ έχει μόνο τη μηδενική λύση, άρα ο πίνακας A είναι μη ιδιάζων.

Ορισμός

Κύριος υποπίνακας ενός πίνακα A είναι εκείνος που σχηματίζεται από τα στοιχεία του A, τα οποία βρίσκονται στις τομές των γραμμών και στηλών $i_1 < i_2 < \cdots < i_r$.

Θεώρημα 2.4.3

Ένας κύριος υποπίνακας ενός θετικά ορισμένου πίνακα είναι θετικά ορισμένος.

Απόδειξη

Έστω ένας κύριος υποπίνακας του A ο οποίος σχηματίζεται από την τομή των γραμμών και στηλών $i_1 < i_2 < \cdots < i_r$. Έστω επιπλέον και $\hat{x} \neq 0$ ένα διάνυσμα τάξης r. Κατασκευάζουμε στη συνέχεια το διάνυσμα x τάξης n τέτοιο ώστε

$$x_{i_k} = \hat{x}_k, \quad k = 1, 2, \ldots, r$$

και όλες οι άλλες $n - r$ συνιστώσες του να είναι μηδέν. Τότε $x \neq 0$ και εύκολα διαπιστώνεται ότι $0 < x^T A x = \hat{x}^T \hat{A} \hat{x}$ επειδή ο A είναι θετικά ορισμένος. ΄ρα και ο $\hat{A}$ είναι θετικά ορισμένος.

Από τα Θεωρήματα 3.4.1, 3.4.2 3.4.3 συνεπάγεται ότι για ένα θετικά ορισμένο πίνακα A υπάρχει μια LDU παραγοντοποίηση.

Θεώρημα 3.4.4

Αν ο A είναι ένας $n \times n$ θετικά ορισμένος πίνακας τότε υπάρχει ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας L με θετικά διαγώνια στοιχεία τέτοιος ώστε

$$A = LL^T \tag{71}$$

Απόδειξη

Επειδή ο A είναι θετικά ορισμένος, συνεπάγεται από τα Θεωρήματα 3.4.1, 3.4.2 3.4.3 ότι υπάρχει μια LU παραγοντοποίηση του A, δηλαδή

$$A = LU$$

όπου ο L είναι ένας κάτω τριγωνικός και ο U ένας άνω τριγωνικός πίνακας. Επειδή ο A είναι θετικά ορισμένος έπεται ότι $a_{ii} > 0, \quad i = 1, 2, \ldots, n$. Επίσης από τον αλγόριθμο της LU μεθόδου έχουμε

$$l_{11} = u_{11} = \sqrt{a_{11}}.$$

Επειδή τώρα ο A είναι συμμετρικός έχουμε

$$l_{j1} = \frac{a_{j1}}{u_{11}} = \frac{a_{1j}}{l_{11}} = u_{1j}, \quad j = 2, 3, \ldots, n \tag{72}$$

και τα στοιχεία της πρώτης γραμμής του U είναι τα ίδια με τα αντίστοιχα στοιχεία της πρώτης στήλης του L.
Επαγωγικά υποθέτουμε ότι $k < n$ και ότι τα στοιχεία των πρώτων k γραμμών του U είναι τα ίδια με τα αντίστοιχα στοιχεία των πρώτων k στηλών του L. Η απόδειξη του θεωρήματος θα είναι πλήρης αν αποδειχθεί ότι τα στοιχεία της $k+1$ γραμμής του U είναι τα ίδια με τα στοιχεία της $k+1$ στήλης του L. Επειδή ο L είναι κάτω τριγωνικός και ο U είναι άνω τριγωνικός είναι φανερό ότι

$$l_{j,k+1} = 0 = u_{k+1,j}, \quad j = 1,\ 2,\ \ldots,\ k.$$

Στη συνέχεια επειδή ο A είναι συμμετρικός έχουμε

$$l_{k+1,k+1}\, u_{k+1,k+1} = a_{k+1,k+1} - \sum_{j=1}^{k} l_{k+1,j}\, u_{j,k+1}$$

ή

$$l_{k+1,k+1}\, u_{k+1,k+1} = a_{k+1,k+1} - \sum_{j=1}^{k} l_{k+1,j}^2$$

και εκλέγουμε (βλ. βήμα 4.1 του αλγορίθμου 2.3.1 της *LU*)

$$l_{k+1,k+1} = u_{k+1,k+1} = \left(a_{k+1,k+1} - \sum_{j=1}^{k} l_{k+1,j}^2 \right)^{1/2} . \tag{73}$$

Η ποσότητα μέσα στην παρένθεση της (73) είναι θετική. Πράγματι ο κύριος υποπίνακας A_{k+1} είναι θετικά ορισμένος λόγω του Θεωρήματος 2.4.3. Η ορίζουσα όμως ενός θετικά ορισμένου υποπίνακα είναι θετική καθόσον ισούται με το γινόμενο των ιδιοτιμών του. Έτσι

$$0 < \det\left(A_{k+1}\right) = \det\left(A_k\right) l_{k+1,k+1}\ u_{k+1,k+1}$$

ή επειδή $\det\left(A_k\right) > 0$,

$$l_{k+1,k+1}\ u_{k+1,k+1} > 0$$

άρα η τιμή του $l_{k+1,k+1}$ που δίνεται από την (73) είναι ένας πραγματικός αριθμός και μπορεί να ληφθεί θετική.

Επιπλέον (βλ. βήμα 4.2 του αλγόριθμου 3.3.1)

$$\begin{aligned} l_{p,k+1} &= \left(a_{p,k+1} - \sum_{j=1}^{k} l_{pj}\ u_{j,k+1} \right) \Big/ \ u_{k+1,k+1} \\ &= \left(a_{k+1,p} - \sum_{j=1}^{k} u_{jp}\ l_{k+1,j} \right) \Big/ \ l_{k+1,k+1} \\ &= u_{k+1,p}, \quad p = k+2, k+2, \ldots, n. \ \square \end{aligned}$$

Η παραγοντοποίηση (71) είναι γνωστή σαν η μέθοδος του Choleski.

Παράδειγμα

Δίνεται ο πίνακας

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & 1 \\ -1 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

Να εφαρμοστεί η μέθοδος του Choleski.

Λύση

Καταρχήν υπολογίζονται τα στοιχεία της πρώτης στήλης του L ως εξής

$$\begin{aligned} l_{11} &= \sqrt{a_{11}} = \sqrt{4} = 2 \\ l_{21} &= \frac{a_{21}}{l_{11}} = \frac{2}{2} = 1 \\ l_{31} &= \frac{a_{31}}{l_{11}} = -\frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Στη συνέχεια υπολογίζονται τα στοιχεία της δεύτερης και τρίτης στήλης του L ως εξής

$$\begin{aligned} l_{22} &= \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = \sqrt{4-1} = \sqrt{3} \\ l_{32} &= \frac{a_{32} - l_{31} l_{21}}{l_{22}} = \frac{1-(-1/2)\cdot 1}{\sqrt{3}} = \frac{\sqrt{3}}{2} \\ l_{33} &= \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = \sqrt{4 - \frac{1}{4} - \frac{3}{4}} = \sqrt{3}. \end{aligned}$$

Συνεπώς

$$L = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & \sqrt{3} & 0 \\ -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & \sqrt{3} \end{bmatrix}.$$

Ο αλγόριθμος του Choleski

1. Διάβασε την τάξη n και τα στοιχεία $a_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq n$ του πίνακα A.
2. Να τεθεί $l_{11} = \sqrt{a_{11}}$
3. Για $j = 2, 3, \ldots, n$ να τεθεί $l_{j1} = a_{j1} / l_{11}$
4. Για $r = 2, 3, \ldots, n-1$ να εκτελεστούν τα βήματα 4.1-4.2

   4.1 Να τεθεί

$$l_{rr} = \left[a_{rr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}^2 \right]^{1/2} . \tag{74}$$

   4.2 Για $p = r+1, r+2, \ldots, n$ να υπολογιστούν

$$l_{pr} = \frac{1}{l_{rr}} \left[a_{pr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{pj}\, l_{rj} \right] . \tag{75}$$

5. Να τεθεί

$$l_{nn} = \left[a_{nn} - \sum_{j=1}^{n-1} l_{nj}^2 \right]^{1/2} . \tag{76}$$

6. Να εκτυπωθούν τα $l_{rp}, \; 1 \leq p \leq r, \; 1 \leq r \leq n$. Τέλος.

Παρατήρηση

Κατά την κωδικοποίηση του αλγόριθμου του Choleski θα πρέπει να ελέγχεται το πρόσημο της ποσότητας στην τετραγωνική ρίζα.

Η LU μέθοδος με μερική οδήγηση

Στην §2.3 διαπιστώσαμε ότι η τριγωνική διαχώριση και η μέθοδος της απαλοιφής του Gauss χωρίς οδήγηση είναι μαθηματικά ίδιες. Ωστόσο οι μέθοδοι εξακολουθούν να είναι ίδιες αν εφαρμοστεί η τεχνική της μερικής οδήγησης; Η απάντηση στο ερώτημα αυτό δίνεται από το παρακάτω θεώρημα.

Θεώρημα 2.5.1

Για ένα $n \times n$ πίνακα A υπάρχει ένας μεταθετικός πίνακας P, ένας μοναδιαίος κάτω τριγωνικός πίνακας L και ένας άνω τριγωνικός πίνακας U τέτοιος ώστε ο πίνακας PA να έχει την τριγωνική διαχώριση

$$PA = LU \tag{77}$$

Απόδειξη

Κατά την απόδειξη του ανωτέρω θεωρήματος αποδεικνύεται ότι το αποτέλεσμα της μερικής οδήγησης κατά τη διάρκεια της διαδικασίας της απαλοιφής είναι μαθηματικά ίδιο με την εφαρμογή της απαλοιφής του Gauss χωρίς οδήγηση σε κάποιο πίνακα PA που λαμβάνεται από τον A μεταθέτοντας τις γραμμές του. Συνεπώς η μέθοδος της τριγωνικής διαχώρισης με μερική οδήγηση είναι ίδια με την παραγοντοποίηση του πίνακα PA.

Επειδή δε $\det P \neq 0$ τα συστήματα $Ax = b$ και

$$PAx = Pb \tag{78}$$

είναι ισοδύναμα και δεν αλλάζει τίποτα αν αντί του A παραγοντοποιήσουμε τον PA. Ο Wilkinson
αποδεικνύει ότι η παρακάτω τεχνική παραγοντοποιεί τον PA χωρίς να είναι ανάγκη να γνωρίζουμε τον P εκ των προτέρων.
Όπως και στη μέθοδο απαλοιφής του Gauss με μερική οδήγηση, εξετάζουμε την πρώτη στήλη του A και εκτελούμε μια εναλλαγή γραμμών αν το a_{11} δεν είναι το στοιχείο με τη μεγαλύτερη απόλυτη τιμή από όλα τα στοιχεία της πρώτης στήλης. Στο σημείο αυτό μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τους τύπους (59) και (60) για τον υπολογισμό της πρώτης γραμμής του U και της πρώτης στήλης του L, αντίστοιχα.

Αν τα στοιχεία αυτά αποθηκευθούν στις αντίστοιχες θέσεις των στοιχείων του A θα έχουμε τον επαυξημένο πίνακα

$$\left[\begin{array}{c|cccc|c|c} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} & b_1 & 0 \\ \hline l_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & b_2 & 0 \\ l_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} & b_3 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} & b_n & 0 \end{array}\right]$$

όπου η στήλη με τα μηδενικά θα εξηγηθεί στη συνέχεια. Για λόγους απλοποίησης του συμβολισμού δεν χρησιμοποιούνται άνω δείκτες για τη δήλωση του εκάστοτε βήματος, ούτε δηλώνονται οι εναλλαγές των γραμμών. Το δεύτερο βήμα είναι ακριβώς το ίδιο με το r βήμα κατά το οποίο υπολογίζονται οι ποσότητες

$$s_r = a_{rr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\ u_{jr}$$

$$\begin{array}{ccccc} s_{r+1} & = & a_{r+1,r} & - & \sum_{j=1}^{r-1} l_{r+1,j}\ u_{jr} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ s_n & = & a_{nr} & - & \sum_{j=1}^{r-1} l_{nj}\ u_{jr} \end{array} \tag{79}$$

Έτσι αν $r = 2$ έχουμε

$$\left[\begin{array}{c|cccc|c|c}
u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} & b_1 & 0 \\ \hline
l_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} & b_2 & s_2 \\
l_{31} & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} & b_3 & s_3 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\
l_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} & b_n & s_n
\end{array}\right].$$

Από τις (79) παρατηρούμε ότι αν $r = 1$ τότε

$$s_1 = a_{11}^{(1)},\ s_2 = a_{21}^{(1)}, \dots,\ s_n = a_{n1}^{(1)}.$$

Αν $r = 2$ τότε

$$\begin{aligned} s_2 &= a_{22}^{(1)} - l_{21}\, u_{12} \\ &= a_{22}^{(1)} + m_{21}\, a_{12}^{(1)} \\ &= a_{22}^{(2)} \end{aligned}$$

όμοια

$$s_3 = a_{32}^{(2)}, \dots\ , s_n = a_{n2}^{(2)}.$$

΄ρα γενικά έχουμε

$$s_r = a_{rr}^{(r)}, \quad s_{r+1} = a_{r+1,r}^{(r)}, \dots, s_n = a_{nr}^{(r)} \tag{80}$$

οπότε η αναζήτηση για το οδηγό στοιχείο αναφέρεται στις ποσότητες s_i.

Πιο συγκεκριμένα ο μικρότερος ακέραιος p για τον οποίο ισχύει

$$|s_p| = \max_{r \leq i \leq n} |s_i|$$

δηλώνει το οδηγό στοιχείο. Αν λοιπόν το s_r δεν είναι οδηγό στοιχείο τότε εναλλάσσουμε τις r και p $\quad (r < p)$ γραμμές του επαυξημένου πίνακα έτσι ώστε το s_p να κατέχει την θέση του s_r. Στο σημείο αυτό παρατηρούμε ότι

$$u_{rr} = s_r$$

και τα υπόλοιπα στοιχεία της r γραμμής του U υπολογίζονται από τις σχέσεις

$$u_{rp} = a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, u_{jp}, \quad p = r+1, r+2, \ldots, n.$$

Όμοια τα στοιχεία της r στήλης του L δίνονται από τις

$$l_{pr} = s_p / u_{rr}, \quad p = r+1, r+2, \ldots, n.$$

Παρατήρηση

Όταν εναλλάσσονται οι γραμμές του επαυξημένου πίνακα, εναλλάσσονται και οι γραμμές στον μερικώς υπολογισθέντα πίνακα L. Αυτό είναι φυσικό να γίνει, γιατί τα στοιχεία l_{ij} συνδέονται με τους πολλαπλασιαστές της απαλοιφής του Gauss και συνεπώς παρατηρούμε ότι μια πιθανή εναλλαγή γραμμών επηρεάζει όλα τα προηγούμενα βήματα.

Παράδειγμα

Δίνεται ο πίνακας

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Να εφαρμοστεί η μέθοδος του Doolittle με μερική οδήγηση.

Λύση

Τριγωνική Διαχώριση

Εύρεση των πινάκων L και U τέτοιων ώστε

$$PA = LU$$

ή

$$PA = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}.$$

Για $r = 1$

$$
\begin{aligned}
p &= 1 \qquad & s_1 &= a_{11} = 2 \\
p &= 2 \qquad & s_2 &= a_{21} = 3 \\
p &= 3 \qquad & s_3 &= a_{31} = 1.
\end{aligned}
$$

Ο επαυξημένος πίνακας είναι

$$A^{(1)} = [A \vdots \mathbf{s}] = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & \vdots & 2 \\ 3 & 1 & 2 & \vdots & 3 \\ 1 & 2 & 1 & \vdots & 1 \end{bmatrix}.$$

Επιλογή οδηγού γραμμής

$$|s_2| = \max\{|s_1|, |s_2|, |s_3|\} = \max\{|2|, |3|, |1|\} = |3|$$

άρα $i_1 = 2$, οπότε εναλλάσεται η $r = 1$ με τη $i_1 = 2$ γραμμή, δηλαδή

$$P_1 = I_{12} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

και

$$\tilde{A}^{(1)} = I_{12}A^{(1)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 & \vdots & 3 \\ 2 & 1 & 1 & \vdots & 2 \\ 1 & 2 & 1 & \vdots & 1 \end{bmatrix}.$$

Υπολογισμός της 1ης γραμμής του U και της 1ης στήλης του L

$$u_{11} = s_1 = 3, \quad u_{12} = a_{12} = 1, \quad u_{13} = a_{13} = 2$$

$$l_{21} = s_2/u_{11} = 2/3, \quad l_{31} = s_3/u_{11} = 1/3.$$

΄ρα

$$\tilde{A}^{(1)} = \left[\begin{array}{c|cc:c} u_{11}=3 & u_{12}=1 & u_{13}=2 & s_1=3 \\ \hline l_{21}=2/3 & a_{22}=1 & a_{23}=1 & s_2 \\ l_{31}=1/3 & a_{32}=2 & a_{33}=1 & s_3 \end{array}\right].$$

Για $r = 2$

έχουμε

$$p = 2 \qquad s_2 = a_{22} - l_{21}u_{12} = 1 - 2/3 \cdot 1 = 1/3$$

$$p = 3 \qquad s_3 = a_{32} - l_{31}u_{12} = 2 - 1/3 \cdot 1 = 5/3.$$

΄ρα

$$A^{(2)} = \left[\begin{array}{c|cc:c} u_{11}=3 & u_{12}=1 & u_{13}=2 & s_1=3 \\ \hline l_{21}=2/3 & a_{22}=1 & a_{23}=1 & s_2=1/3 \\ l_{31}=1/3 & a_{32}=2 & a_{33}=1 & s_3=5/3 \end{array}\right].$$

Επιλογή οδηγού γραμμής

$$|s_3| = \max\{|s_2|, |s_3|\} = \max\{|1/3|, |5/3|\} = 5/3$$

άρα $i_2 = 3$ οπότε εναλλάσεται η $r = 2$ με την $i_2 = 3$ γραμμή, δηλαδή

$$P_2 = I_{23} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

και

$$\tilde{A}^{(2)} = I_{23} A^{(2)} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 & \vdots & 3 \\ 1/3 & 2 & 1 & \vdots & 5/3 \\ 2/3 & 1 & 1 & \vdots & 1/3 \end{bmatrix}.$$

Υπολογισμός της 2ης γραμμής του U και της 2ης στήλης του L

$$u_{22} = s_2 = 5/3, \qquad u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13} = 1 - 1/3 \cdot 2 = 1/3$$

$$l_{32} = s_3/u_{22} = 1/5.$$

΄ρα

$$\tilde{A}^{(2)} = \left[\begin{array}{ccccc} u_{11} = 3 & u_{12} = 1 & u_{13} = 2 & \vdots & s_1 = 3 \\ l_{21} = 1/3 & u_{22} = 5/3 & u_{23} = 1/3 & \vdots & s_2 = 5/3 \\ \cline{2-3} l_{31} = 2/3 & \multicolumn{1}{c|}{l_{32} = 1/5} & a_{33} = 1 & \vdots & s_3 \end{array}\right].$$

Για $r = 3$

$p = 3$ $\qquad s_3 = a_{33} - l_{31} \cdot u_{13} - l_{32} \cdot u_{23} = 1 - 2/3 \cdot 2 - 1/5 \cdot 1/3 = -2/5.$

Υπολογισμός της 3ης γραμμής του U

$$u_{33} = s_3 = -2/5.$$

΄ρα

$$A^{(3)} = \left[\begin{array}{ccccc} u_{11} = 3 & u_{12} = 1 & u_{13} = 2 & \vdots & s_1 = 3 \\ l_{21} = 1/3 & u_{22} = 5/3 & u_{23} = 1/3 & \vdots & s_2 = 5/3 \\ l_{31} = 2/3 & l_{32} = 1/5 & \underline{u_{33} = -2/5} & \vdots & s_3 = -2/5 \end{array}\right].$$

οπότε είναι

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1 & 0 \\ 2/3 & 1/5 & 1 \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad U = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 0 & 5/3 & 1/3 \\ 0 & 0 & -2/5 \end{bmatrix}$$

Πράγματι

$$LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/3 & 1 & 0 \\ 2/3 & 1/5 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 0 & 5/3 & 1/3 \\ 0 & 0 & -2/5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$P = P_2 P_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Συνεπώς ισχύει

$$PA = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 1 \\ 2 & 1 & 1 \end{bmatrix} = LU.$$

Επίλυση του γραμμικού συστήματος

$$Ax = b \text{ ή } PAx = Pb$$

όπου

$$b = \begin{bmatrix} 7 \\ 12 \\ 3 \end{bmatrix} \quad \text{και} \quad b^{'} = Pb = \begin{bmatrix} 12 \\ 3 \\ 7 \end{bmatrix}. \tag{81}$$

Αφού $PA = LU$ έχουμε ισοδύναμα ότι $LUx = Pb(= b^{'})$ ή

$$1.\ Ly = b^{'} \qquad \text{και} \qquad 2.\ Ux = y.$$

1. Επίλυση του κάτω τριγωνικού συστήματος $Ly = b'$ (με προς τα εμπρός αντικατάσταση)

$$\begin{aligned}
y_1 &= b_1 && = 12 && \\
y_2 &= b_2 - l_{12} y_1 && = 3 - 1/3 \cdot 12 && = -1 \\
y_3 &= b_3 - l_{31} y_1 - l_{32} y_2 && = 7 - 2/3 \cdot 12 - 1/5 \cdot (-1) && = -4/5
\end{aligned}$$

ή

$$y = \begin{bmatrix} 12 \\ -1 \\ -4/5 \end{bmatrix}.$$

2. Επίλυση του άνω τριγωνικού συστήματος $Ux = y$ (με προς τα πίσω αντικατάσταση)

$$\begin{aligned}
x_3 &= y_3 / u_{33} && = 2 && \\
x_2 &= (y_2 - u_{23} x_3)/u_{22} && = (-1 - 1/3 \cdot 2)/5/3 && = -1 \\
x_1 &= (y_1 - u_{12} x_2 - u_{13} x_3)/u_{11} && = (12 - 1 \cdot (-1) - 2 \cdot 2)/3 && = 3
\end{aligned}$$

ή

$$x = \begin{bmatrix} 3 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Ο αλγόριθμος της LU μεθόδου με μερική οδήγηση

1. Διάβασε την τάξη n, τα στοιχεία a_{ij}, $1 \leq i \leq n$, $1 \leq j \leq n+1$ του επαυξημένου πίνακα του A και τα στοιχεία l_{ii}, $1 \leq i \leq n$ του L ή τα στοιχεία u_{ii}, $1 \leq i \leq n$ του U.
2. Έστω p ο μικρότερος ακέραιος τέτοιος ώστε $1 \leq p \leq n$ και

$$|a_{p1}| = \max_{1 \leq j \leq n} |a_{j1}|$$

   (εύρεση του πρώτου οδηγού στοιχείου)

   Αν $|a_{p1}| = 0$ τότε τύπωσε ``Δεν υπάρχει μοναδική λύση''. Τέλος.
3. Αν $p \neq 1$ τότε να εναλλαχθούν οι γραμμές p και 1 στον A.
4. Να επιλεγούν l_{11} και u_{11} τέτοια ώστε να ικανοποιείται η

$$l_{11}\, u_{11} = a_{11}$$

5. Για $j = 2, 3, \ldots, n$ να τεθεί

$$\begin{aligned} u_{1j} &= a_{1j}/l_{11} \quad \text{(πρώτη γραμμή του } U\text{)} \\ l_{j1} &= a_{j1}/u_{11} \quad \text{(πρώτη στήλη του } L\text{)} \end{aligned}$$

6. Για $r = 2, 3, \ldots, n-1$ να εκτελεσθούν τα βήματα 6.1-6.4.

   6.1 Έστω p ο μικρότερος ακέραιος τέτοιος ώστε $r \leq p \leq n$ και

$$|s_p| = \max_{r \leq k \leq n} \{|s_k|\},$$

   όπου

$$s_k = a_{kr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{kj}\, u_{jr}$$

   (εύρεση του οδηγού στοιχείου)

   Αν $|s_p| = 0$, τότε τύπωσε ``Δεν υπάρχει μοναδική λύση''

   6.2 Αν $p \neq r$ τότε εναλλαγή των γραμμών p και r και στους δύο πίνακες A και L.

   6.3 Να επιλεγούν l_{rr} και u_{rr} που να ικανοποιούν την

$$l_{rr}\, u_{rr} = a_{rr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, u_{jr}$$

6.4 Για $p = r+1, r+2, \ldots, n$ να τεθεί

$$u_{rp} = \left(a_{rp} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{rj}\, u_{jp} \right) / l_{rr} \quad (r \text{ γραμμή του } U)$$

$$l_{pr} = \left(a_{pr} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{pj}\, u_{jr} \right) / u_{rr} \quad (r \text{ στήλη του } L)$$

7. Να τεθεί

$$s_n = a_{nn} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{nj}\, u_{jn}$$

Αν $s_n = 0$ τότε τύπωσε ``Δεν υπάρχει μοναδική λύση''. Τέλος.
Να επιλεγούν l_{nn} και u_{nn} τέτοια ώστε να ικανοποιείται η

$$l_{nn}\, u_{nn} = a_{nn} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{nj}\, u_{jn}$$

Επίλυση του κάτω τριγωνικού συστήματος $Lz = b$

8. Να τεθεί

$$z_1 = a_{1,n+1}/l_{11}$$

9. Για $i = 2, 3, \ldots, n$ να τεθεί

$$z_i = \left(a_{i,n+1} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij}\, z_j \right) \Big/ \, l_{ii}$$

Επίλυση του άνω τριγωνικού συστήματος $Ux = z$

10. Να τεθεί

$$x_n = z_n/u_{nn}$$

11. Για $i = n-1, n-2, \ldots, 1$ να τεθεί

$$x_i = \left(z_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}\, x_j \right) \Big/ \, u_{ii}$$

12. Να τυπωθούν τα x_i, $1 \leq i \leq n$. Τέλος.

Επίλυση τριδιαγώνιου συστήματος
με τη μέθοδο απαλοιφής του Gauss χωρίς οδήγηση

$$
\begin{array}{lllllll}
b_1x_1 & +c_1x_2 & & & & = & d_1 \\
a_2x_1 & +b_2x_2 & +c_2x_3 & & & = & d_2 \\
 & a_3x_2 & +b_3x_3 & +c_3x_4 & & = & d_3 \\
 & & \cdots\cdots & & & & \\
 & & & \cdots\cdots & & & \\
 & & & a_{n-1}x_{n-2} & +b_{n-1}x_{n-1} & +c_{n-1}x_n & = d_{n-1} \\
 & & & & a_nx_{n-1} & +b_nx_n & = d_n
\end{array}
\tag{82}
$$

Είναι φανερό ότι η μέθοδος θα πρέπει να λάβει υπόψη της τη δομή του συστήματος προκειμένου να εξοικονομηθεί ουσιαστική υπολογιστική δουλειά.

$$m_1 = -\frac{a_2}{b_1}$$

και παράγοντας τη νέα δεύτερη εξίσωση

$$b_2'x_2 + c_2x_3 = d_2'$$

όπου

$$b_2' = b_2 + m_1c_1 \qquad \text{και} \qquad d_2' = d_2 + m_1d_1 .$$

Όμοια αν $b_2' \neq 0$, ο x_2 μπορεί να απαλειφθεί από την τρίτη εξίσωση, ανορισθεί ο πολλαπλασιαστής

$$m_2 = -\frac{a_3}{b_2'}$$

οπότε λαμβάνουμε τη νέα τρίτη εξίσωση

$$b_3' x_3 + c_3 x_4 = d_3'$$

όπου

$$b_3' = b_3 + m_2 c_2 \qquad \text{και} \qquad d_3' = d_3 + m_2 d_2.$$

Συνεχίζοντας στο i-οστό βήμα, ο x_i θα απαλειφθεί από την $i+1$ εξίσωση, αν ορισθεί ο πολλαπλασιαστής

$$m_i = -\frac{a_{i+1}}{b'_i} \tag{83}$$

οπότε λαμβάνεται η νέα $i+1$ εξίσωση

$$b'_{i+1}x_{i+1} + c_{i+1}x_{i+2} = d'_{i+1} \tag{84}$$

όπου

$$b'_{i+1} = b_{i+1} + m_i c_i \qquad \text{και} \qquad d'_{i+1} = d_{i+1} + m_i d'_i. \tag{85}$$

Για $i = 1, 2, \ldots, n-1$ θα λάβουμε τελικά το σύστημα

$$\begin{array}{llllll} b'_1 x_1 + & c_1 x_2 & & & = & d'_1 \\ & b'_2 x_2 + & c_2 x_3 & & = & d'_2 \\ & \ldots & & & & \\ & & \ldots & & & \\ & & b'_{n-1} x_{n-1} + & c_{n-1} x_n & = & d'_{n-1} \\ & & & b'_n x_n & = & d'_n \end{array} \tag{86}$$

όπου $b'_1 = b_1$ και $d'_1 = d_1$.

Η λύση του ανωτέρω συστήματος είναι η

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{d'_n}{b'_n}, \quad b'_n \neq 0 \\ x_i &= \left(d'_i - c_i x_{i+1}\right) / \, b'_i, \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1 \end{aligned} \tag{87}$$

με $b'_i \neq 0$.

Αλγόριθμος

1. Διάβασε την τάξη n του A, τα $b_i, \ 1 \leq i \leq n, \ c_i, \ 1 \leq i \leq n-1$, τα $a_i, \quad 2 \leq i \leq n$ και τα $d_i, \quad 1 \leq i \leq n$
2. Για $i = 1, 2, \ldots, n-1$ να εκτελεστούν τα βήματα 2.1-2.3

   2.1 Να τεθεί
$$m_i = -\frac{a_{i+1}}{b_i}$$

   2.2 Να τεθεί
$$b_{i+1} = b_{i+1} + m_i c_i$$

   2.3 Να τεθεί
$$d_{i+1} = d_{i+1} + m_i d_i$$

Επίλυση του συστήματος

3 3.1 Αν $b_n = 0$ τότε τύπωσε ``Δεν υπάρχει μοναδική λύση''. Τέλος.

3.2 Να τεθεί

$$x_n = \frac{d_n}{b_n}$$

3.3 Για $i = n-1, n-2, \ldots, 1$ να τεθεί

$$x_i = \left(d_i - c_i x_{i+1}\right)/b_i$$

- Να τυπωθεί η λύση $x_i, \ 1 \leq i \leq n$. Τέλος.

Επίλυση τριδιαγώνιου συστήματος με την μέθοδο τριγωνικής διαχώρισης LU.

Παρατηρούμε ότι ο A έχει μόνο $(3n-2)$ μη μηδενικά στοιχεία, πράγμα που σημαίνει ότι το σύνολο των στοιχείων τόσο του L όσο και του U θα πρέπει να είναι επίσης $(3n-2)$. Αν υποθέσουμε ότι

$$L = \begin{bmatrix} l_1 & & & & \\ k_2 & l_2 & & & 0 \\ & k_3 & l_3 & & \\ 0 & & \ddots & \ddots & \\ & & & k_n & l_n \end{bmatrix} \text{ και } U = \begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & & \\ & 1 & u_2 & & & 0 \\ & & 1 & u_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & & & 1 & u_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{bmatrix} \tag{88}$$

τότε υπάρχουν $(2n-1)$ άγνωστα στοιχεία του L και $(n-1)$ άγνωστα στοιχεία του U, δηλαδή έχουμε $(3n-2)$ άγνωστα στοιχεία τα οποία μπορούν να προσδιοριστούν από την $A = LU$, η οποία δίνει τις εξισώσεις

$$
\begin{array}{rclrclrcl}
l_1 & = & b_1, & l_1 u_1 & = & c_1, & k_2 & = & a_2 \\
k_2 u_1 + l_2 & = & b_2, & l_2 u_2 & = & c_2, & k_3 & = & a_3 \\
& \vdots & & & \vdots & & & \vdots & \\
k_n u_{n-1} + l_n & = & b_n & & & & k_n & = & a_n
\end{array}
\tag{89}
$$

ή

$$
\begin{aligned}
l_1 &= b_1 \\
u_1 &= c_1/l_1 \\
k_i &= a_i, \quad i = 2, 3, \ldots, n \\
l_i &= b_i - k_i u_{i-1}, \quad i = 2, 3, \ldots, n \\
u_i &= c_i/l_i, \quad i = 2, 3, \ldots, n-1
\end{aligned}
\tag{90}
$$

ή τελικά

$$
\begin{aligned}
l_1 &= b_1 \\
u_1 &= c_1/l_1 \\
l_i &= b_i - a_i u_{i-1}, \quad i = 2, 3, \ldots, n \\
u_i &= c_i/l_i, \quad i = 2, 3, \ldots, n-1.
\end{aligned}
\tag{91}
$$

Το σύστημα (82) τώρα γράφεται

$$LUx = d$$

ή

$$Lz = d \tag{92}$$

και

$$Ux = z. \tag{93}$$

Η λύση του (92) δίνεται από τους τύπους

$$\begin{aligned} z_1 &= d_1/l_1 \\ z_i &= (d_i - a_i\, z_{i-1})/l_i, \quad i = 2, 3, \ldots, n \end{aligned} \tag{94}$$

ενώ η λύση του (93) είναι η

$$\begin{aligned} x_n &= z_n \\ x_i &= z_i - u_i\, x_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1. \end{aligned} \tag{95}$$

Παράδειγμα

Έστω το τριδιαγώνιο σύστημα

$$\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Να επιλυθεί το ανωτέρω σύστημα με τη μέθοδο του Crout.

Λύση

Έχουμε ότι $n = 4, \quad b_1 = b_2 = b_3 = b_4 = 2, \quad a_2 = a_3 = a_4 = -1, \quad c_1 = c_2 = c_3 = -1$
και $d_1 = 1, \ d_2 = 0, \ d_3 = 0$ και $d_4 = 1$
Από την (91) έχουμε διαδοχικά $l_1 = 2, \quad u_1 = -1/2$. Για $i = 2$

$$\begin{aligned} l_2 &= b_2 - a_2\, u_1 = 2 - (-1)\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{3}{2} \\ u_2 &= c_2/l_2 = -1/\left(\frac{3}{2}\right) = -\frac{2}{3}. \end{aligned}$$

Για $i = 3$

$$\begin{aligned} l_3 &= b_3 - a_3\, u_2 = 2 - (-1)\left(-\frac{2}{3}\right) = \frac{4}{3} \\ u_3 &= c_3/l_3 = -1/\left(\frac{4}{3}\right) = -\frac{3}{4}. \end{aligned}$$

για $i = 4$

$$l_4 = b_4 - a_4\, u_3 = 2 - (-1)\left(-\frac{3}{4}\right) = \frac{5}{4}.$$

Η (94) δίνει διαδοχικά τα ακόλουθα

$$z_1 = d_1/l_1 = 1/2.$$

Για $i = 2, 3, 4$ έχουμε

$$z_2 = \frac{d_2 - a_2 z_1}{l_2} = \frac{0 - (-1)\left(\frac{1}{2}\right)}{\left(\frac{3}{2}\right)} = \frac{1}{3}$$

$$z_3 = \frac{d_3 - a_3 z_2}{l_3} = \frac{0 - (-1)\left(\frac{1}{3}\right)}{\left(\frac{4}{3}\right)} = \frac{1}{4}$$

$$z_4 = \frac{d_4 - a_4 z_3}{l_4} = \frac{1 - (-1)\left(\frac{1}{4}\right)}{\left(\frac{5}{4}\right)} = 1.$$

και για $i = 3, 2, 1$

$$\begin{aligned} x_3 &= z_3 - u_3\, x_4 = \frac{1}{4} - \left(-\frac{3}{4}\right)\cdot 1 = 1 \\ x_2 &= z_2 - u_2\, x_3 = \frac{1}{3} - \left(-\frac{2}{3}\right)\cdot 1 = 1 \\ x_1 &= z_1 - u_1\, x_2 = \frac{1}{2} - \left(-\frac{1}{2}\right)\cdot 1 = 1. \end{aligned}$$

Παρατηρούμε ότι η μέθοδος έδωσε την ακριβή λύση $x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 1$

Αλγόριθμος της μεθόδου Crout
για την επίλυση του τριδιαγώνιου συστήματος

1. Διάβασε την τάξη n του A, τα b_i, $1 \leq i \leq n$, τα a_i, $2 \leq i \leq n$, τα c_i, $1 \leq i \leq n-1$ και τα d_i, $1 \leq i \leq n$
2. Να τεθεί
$$l_1 = b_1$$
και
$$u_1 = c_1 / l_1$$
3. Για $i = 2, 3, \ldots, n-1$ να τεθεί
$$l_i = b_i - a_i \, u_{i-1}$$
$$u_i = c_i / l_i$$
4. Να τεθεί
$$l_n = b_n - a_n \, u_{n-1}$$

(Τα βήματα 5 και 6 επιλύουν το $Lz = d$)

5 Να τεθεί

$$z_1 = d_1 / l_1$$

6 Για $i = 2, 3, \ldots, n$ να τεθεί

$$z_i = \left(d_i - a_i\, z_{i-1}\right) / \; l_i$$

(Τα βήματα 7 και 8 επιλύουν το $Ux = z$)

7 Να τεθεί

$$x_n = z_n$$

8 Για $i = n-1, n-2, \ldots, 1$ να τεθεί

$$x_i = z_i - u_i\, x_{i+1}$$

9 Να τυπωθεί η λύση $x_i, \quad 1 \leq i \leq n$. Τέλος.

Norms διανυσμάτων

Μια *norm* διανύσματος $\|.\|$ είναι μια συνάρτηση ορισμένη στο διανυσματικό χώρο $\mathbb{C}^n$ με πραγματικές και μη αρνητικές τιμές με τις παρακάτω ιδιότητες:

$$\begin{aligned} &\text{i)} \|x\| > 0 \text{ αν } x \neq 0, \quad \|x\| = 0 \text{ αν } x = 0, \quad \text{για κάθε } x \in \mathbb{C}^n \\ &\text{ii)} \|cx\| = |c| \cdot \|x\| \quad \text{για κάθε } c \in \mathbb{C} \text{ και } x \in \mathbb{C}^n \\ &\text{iii)} \|x+y\| \leq \|x\| + \|y\| \text{ για } x, y \in \mathbb{C}^n \text{ (τριγωνική ανισότητα)} \end{aligned} \tag{96}$$

l_p − norms (Hölder norms)

$$\|x\|_p = \begin{cases} \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p \right)^{1/p}, & p = 1, 2, 3, \ldots \\ \max_i |x_i|, & p = \infty \end{cases} \tag{97}$$

Norms διανυσμάτων

Οι περισσότερο χρησιμοποιούμενες *norms* είναι οι l_1, l_2 και $l_\infty - norm$.

$$
\begin{aligned}
\|x\|_1 &= \sum_{i=1}^{n} |x_i| && \text{αθροιστική norm} \\
\|x\|_2 &= \left(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2 \right)^{1/2} && \text{Ευκλείδια norm} \\
\|x\|_\infty &= \max_i |x_i| && \text{Μεγίστη norm}
\end{aligned}
\tag{98}
$$

Norms πινάκων

Μια norm πίνακα είναι μια συνάρτηση ορισμένη στο $\mathbb{C}^{nn}$ με πραγματικές τιμές $\|\cdot\|$ που έχει τις ιδιότητες:

$$
\begin{aligned}
&\text{i)}\|A\| > 0,\ \text{εκτός αν } A = 0 \text{ οπότε } \|A\| = 0\\
&\text{ii)}\|cA\| = |c|\ \|A\|,\quad \text{όπου}\ \ c \text{ βαθμωτό μέγεθος}\\
&\text{iii)}\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|\\
&\text{iv)}\|AB\| \leq \|A\|\ \|B\|
\end{aligned} \tag{99}
$$

Norms πινάκων

Οι norms πινάκων που αντιστοιχούν στις διανυσματικές norms ορίζονται από τον τύπο

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \{\|Ax\|\}$$

από τον οποίο προκύπτει η σχέση

$$\|Ax\| \leq \|A\|\ \|x\| \tag{100}$$

Norms πινάκων

Οι τρεις *norms* πινάκων που αντιστοιχούν στις διανυσματικές norms δίνονται από τους τύπους

$$\|A\|_1 = \max_{j} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$$

$$\|A\|_\infty = \max_{i} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \tag{101}$$

$$\|A\|_2 = [\rho(A^H A)]^{1/2}$$

όπου $\rho(A) = \max_{1 \le i \le n} |\lambda_i|$ (*η φασματική ακτίνα του A*), όπου λ_i οι ιδιοτιμές του A και A^H είναι ο συζυγής ανάστροφος του A.

Θεώρημα 3.6.5

Ικανή και αναγκαία συνθήκη για να ισχύει η

$$\lim_{k\to\infty} x^{(k)} = x$$

είναι η

$$\lim_{k\to\infty} \|x^{(k)} - x\| = 0.$$

Θεώρημα 3.6.6

Ικανή και αναγκαία συνθήκη για να ισχύει η

$$\lim_{k\to\infty} A^{(k)} = A$$

είναι η

$$\lim_{k\to\infty} \|A^{(k)} - A\| = 0.$$

Θεώρημα 3.6.7

Ικανή και αναγκαία συνθήκη για να συγκλίνει η ακολουθία $\{A^{\kappa}\}$ των διαδοχικών δυνάμεων ενός πίνακα A τάξης n, στο μηδενικό πίνακα είναι η

$$\rho(A) < 1 \tag{102}$$

Θεώρημα 3.6.8

Για κάθε πίνακα τάξης n ισχύει

$$\|A^{\kappa}\| \leq \|A\|^{\kappa}, \quad \kappa = 0, 1, 2, \ldots$$

Θεώρημα 3.6.9

Ικανή συνθήκη για τη σύγκλιση της ακολουθίας $\{A^{\kappa}\}$ των διαδοχικών δυνάμεων ενός πίνακα A τάξης n στο μηδενικό πίνακα είναι η

$$\|A\| < 1$$

Απόδειξη

Από το Θεώρημα 3.6.6 έχουμε ότι $\lim\limits_{\kappa\to 0} A^{\kappa} = 0$ αν $\lim\limits_{\kappa\to\infty} \|A^{\kappa}\| = 0$ αλλά λόγω του θεωρήματος 3.6.8 αρκεί $\lim\limits_{\kappa\to\infty} \|A\|^{\kappa} = 0$ η οποία για να ισχύει θα πρέπει $\|A\| < 1$.■

Θεώρημα 3.6.10

Για κάθε πίνακα A τάξης n ισχύει

$$\rho(A) \leq \|A\| \tag{103}$$

Απόδειξη

Αν λ είναι μια ιδιοτιμή του A και x το αντίστοιχο ιδιοδιάνυσμα τότε

$$Ax = \lambda x$$

οπότε λαμβάνοντας τις norms των δύο μελών έχουμε

$$\|Ax\| = \|\lambda x\|$$

ή εφαρμόζοντας ιδιότητες των norms

$$|\lambda| \; \|x\| \; \leq \|A\| \; \|x\|$$

ή

$$|\lambda| \leq \|A\|$$

συνεπώς

$$\rho(A) = \max |\lambda| \; \leq \|A\|. \blacksquare$$

Ασταθή συστήματα

Δίνεται το γραμμικό σύστημα

$$Ax = b \tag{104}$$

Υποθέτουμε ότι υπάρχουν αρχικά σφάλματα τόσο στον πίνακα A όσο και στο διάνυσμα b. Έστω δA και δb οι διαταράξεις στον A και b, αντίστοιχα. Τότε, με την προϋπόθεση ότι δεν εισχωρούν νέα σφάλματα κατά την επίλυση, αντί για την ακριβή τιμή του διανύσματος x, θα βρίσκουμε ένα διάνυσμα που θα περιέχει μία διατάραξη δx. Έτσι θα έχουμε το διαταραγμένο σύστημα

$$(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b \tag{105}$$

και είναι δυνατόν να βρούμε το ακόλουθο φράγμα για το σχετικό σφάλμα στο διάνυσα λύση.

Θεώρημα 7.1

Έστω ο μη ιδιάζων πίνακας A με

$$\|A^{-1}\| \; \|\delta A\| < 1 \tag{106}$$

τότε

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa}{1 - \|\delta A\| \; \|A^{-1}\|} \left[\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \right] \tag{107}$$

όπου

$$\kappa = \kappa(A) = \|A^{-1}\| \; \|A\| \tag{108}$$

Ασταθή συστήματα

Πόρισμα 7.2

Αν $\delta A = 0$ τότε

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \; \|A^{-1}\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

Πόρισμα 7.3

Αν $\delta b = 0$ τότε

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} = \frac{\|A\| \; \|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\| \; \|\delta A\|} \cdot \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}.$$

Ασταθή συστήματα

Παρατηρήσεις

(i) Αν η διαταραχή δA είναι πολύ μικρή, τότε από το Πόρισμα 7.2 (όπου $\delta A = 0$), η σχετική αλλαγή στη λύση είναι φραγμένη από την ποσότητα $\kappa(A) = \|A^{-1}\| \, \|A\|$.

(ii) Αν $\kappa(A)$ είναι μικρό, τότε μια μικρή διαταραχή του A ή μια μικρή διαταραχή του b ή μικρές διαταραχές των A και b δεν επιτρέπουν μεγάλες αλλαγές στη λύση x.

(iii) $\kappa = \|A^{-1}\| \, \|A\| \geq \|A^{-1} \, A\| = \|I\| = 1$

Ασταθή συστήματα

Ορισμός

Αν ο A είναι μη ιδιάζων, τότε

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \tag{109}$$

είναι ο **αριθμός συνθήκης** για το σύστημα $Ax = b$

Αν $\kappa(A)$ είναι ένας μεγάλος αριθμός, τότε μικρές διαταραχές του A ή b είναι δυνατόν να προκαλέσουν μεγάλες διαταραχές στη λύση x του συστήματος. Σε αυτή την περίπτωση λέμε ότι το σύστημα είναι **ασταθές** (ill-conditioned).

Θεώρημα 7.4

Αν ο A είναι πραγματικός και συμμετρικός, τότε

$$\kappa(\mathbf{A}) = \left|\frac{\lambda_1}{\lambda_n}\right| \tag{110}$$

όπου λ_1 και λ_n είναι η μεγαλύτερη και η μικρότερη κατά απόλυτο τιμή ιδιοτιμές του A, αντίστοιχα.

Παρατηρήσεις

- Η μέθοδος απαλοιφής του Gauss με μερική οδήγηση θα πρέπει να προτιμάται για την επίλυση πυκνών γραμμικών συστημάτων. Η μέθοδος αυτή είναι ευσταθής τουλάχιστον για μία μεγάλη κλάση προβλημάτων, όπως αποδεικνύει ο Wilkinson.
- Επίσης για πίνακες οι οποίοι είναι **πραγματικοί συμμετρικοί** και **θετικά ορισμένοι** δεν χρειάζεται η μερική οδήγηση προκειμένου η μέθοδος του Gauss να έχει αριθμητική ευστάθεια.