Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση

Σταμάτης Σταματιάδης
stamatis@materials.uoc.gr

Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών,
Πανεπιστήμιο Κρήτης

ΤΕΤΑΡΤΗ ΔΙΑΛΕΞΗ

Εύρεση λύσης γραμμικού συστήματος

Οι ακόλουθες εξισώσεις αποτελούν ένα γραμμικό σύστημα $n \times n$:

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

Οι συντελεστές a_{ij} και οι σταθεροί όροι b_i είναι γνωστοί, ενώ τα n x_i είναι άγνωστα και προς εύρεση.

Εύρεση λύσης γραμμικού συστήματος

Οι ακόλουθες εξισώσεις αποτελούν ένα γραμμικό σύστημα $n \times n$:

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

Οι συντελεστές a_{ij} και οι σταθεροί όροι b_i είναι γνωστοί, ενώ τα n x_i είναι άγνωστα και προς εύρεση.

Το σύστημα μπορεί να εκφραστεί με την βοήθεια των πινάκων και διανυσμάτων $A_{n\times n} = [a_{ij}]$, $x_{n\times 1} = [x_i]$ και $b_{n\times 1} = [b_i]$ ως εξής

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

Αν όλα τα b_i είναι 0, το σύστημα χαρακτηρίζεται ως *ομογενές*.

Επίλυση γραμμικής εξίσωσης μίας μεταβλητής

Στη διαδικασία επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος θα χρειαστεί να λύσουμε πρωτοβάθμιες εξισώσεις.
Ας θυμηθούμε πώς επιλύεται η εξίσωση $ax = b$:

- Αν $a \neq 0$ η εξίσωση έχει μία λύση, την $x = b/a$.
- Αν $a = 0$ εξετάζουμε το b:
  - Αν $b \neq 0$ η εξίσωση δεν έχει λύση.
  - Αν $b = 0$ η εξίσωση έχει άπειρες λύσεις (οποιοδήποτε x ικανοποιεί την $0x = 0$).

Αντίστροφος πίνακας

- Για κάθε *τετραγωνικό* πίνακα A *μπορεί* να υπάρχει ένας τετραγωνικός πίνακας που έχει την ιδιότητα όταν πολλαπλασιάζει τον A, είτε από δεξιά είτε από αριστερά, να δίνει ως αποτέλεσμα τον ταυτοτικό πίνακα. Τον συμβολίζουμε με A^{-1} και πρέπει να ικανοποιεί τη σχέση

$$A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I\,.$$

- Αν υπάρχει ο A^{-1}, είναι μοναδικός και ονομάζεται *αντίστροφος* του A.
- Ο πίνακας A στην περίπτωση που υπάρχει ο αντίστροφός του χαρακτηρίζεται ως *αντιστρέψιμος*.
- Από τον ορισμό του αντίστροφου πίνακα προκύπτει ότι ο αντίστροφος του A^{-1} είναι ο A.

Ορίζουσα

- Η ορίζουσα είναι ένας αριθμός που σχετίζεται με κάθε τετραγωνικό πίνακα.
- Μπορεί να οριστεί με πολλούς ισοδύναμους τρόπους. Ένας ορισμός είναι το *ανάπτυγμα Laplace*: η ορίζουσα δίνεται ως ανάπτυγμα κατά κάποια στήλη j της επιλογής μας με την αναδρομική σχέση

  $$\det(A) = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ij} \det(A_{ij}) \ ,$$

  όπου A_{ij} είναι ο πίνακας διαστάσεων $(n-1) \times (n-1)$ που προκύπτει από τον A διαγράφοντας τη γραμμή i και τη στήλη j.
- Ο τύπος ισχύει για $n > 1$ και είναι ανεξάρτητος από την επιλογή του j. Αντίστοιχος τύπος προκύπτει με ανάπτυξη κατά γραμμή.
- Η ορίζουσα ενός πίνακα 1×1 είναι το μοναδικό στοιχείο του.

Συνθήκες επιλυσιμότητας

Το σύστημα $A \cdot x = b$ έχει μοναδική λύση, για οποιοδήποτε δεύτερο μέλος b, όταν (μεταξύ άλλων):

- Η ορίζουσα του A είναι μη μηδενική.
- Ο πίνακας A έχει αντίστροφο.

Το σύστημα $A \cdot x = b$ χαρακτηρίζεται ως *ασταθές* αν έχουμε μεγάλη απόκλιση στη λύση για μικρές αλλαγές στα A, b.

Παράδειγμα

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 3.001 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 4.001 \end{bmatrix}$$

έχει λύση $x_1 = x_2 = 1$.
Το ελαφρά διαφορετικό σύστημα

$$\begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 1 & 2.999 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 4.002 \end{bmatrix}$$

έχει λύση $x_1 = 10$, $x_2 = -2$, τελείως διαφορετική.

Δείκτης κατάστασης (condition number)

Ο *δείκτης κατάστασης*, κ, του πίνακα A μπορεί να οριστεί ως

$$\kappa = ||A|| \cdot ||A^{-1}|| \ ,$$

όπου π.χ.

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

- Ο δείκτης κατάστασης είναι ιδιότητα του πίνακα.
- Ισχύει πάντα $\kappa \geq 1$.
- Αν $\kappa \gg 1$ το σύστημα είναι ασταθές (ill-conditioned).
- Αν ο δείκτης κατάστασης είναι πολύ κοντά στο 1, τότε η λύση που θα υπολογίσουμε, με οποιαδήποτε μέθοδο, θα έχει ακρίβεια παρόμοια με την ακρίβεια των στοιχείων του πίνακα.

Απευθείας μέθοδοι

Οι απευθείας μέθοδοι επίλυσης γραμμικών συστημάτων δίνουν την ακριβή λύση (με κάποιο σφάλμα στρογγύλευσης) σε συγκεκριμένο και εκ των προτέρων υπολογίσιμο αριθμό βημάτων/πράξεων.
Μέθοδοι αυτής της κατηγορίας: αντίστροφου πίνακα, Cramer, Gauss, Gauss–Jordan, ανάλυση LU.

Κατηγορίες μεθόδων επίλυσης

Απευθείας μέθοδοι

Οι απευθείας μέθοδοι επίλυσης γραμμικών συστημάτων δίνουν την ακριβή λύση (με κάποιο σφάλμα στρογγύλευσης) σε συγκεκριμένο και εκ των προτέρων υπολογίσιμο αριθμό βημάτων/πράξεων.
Μέθοδοι αυτής της κατηγορίας: αντίστροφου πίνακα, Cramer, Gauss, Gauss–Jordan, ανάλυση LU.

Επαναληπτικές Μέθοδοι

Σε αυτή την κατηγορία μεθόδων ξεκινάμε από μια αρχική προσέγγιση της λύσης, $x^{(0)}$, και παράγουμε μια ακολουθία καλύτερων προσεγγίσεων $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$ η οποία συγκλίνει στη λύση σε άπειρες επαναλήψεις. Στην πράξη, μια προσέγγιση $x^{(k)}$ είναι ικανοποιητική όταν

- το διάνυσμα $Ax^{(k)} - b$ έχει «μικρό» μέτρο ή «μικρά» (κατ' απόλυτη τιμή) στοιχεία.
- Η διαφορά (ή η σχετική διαφορά) των $x^{(k+1)}$ και $x^{(k)}$ έχει «μικρό» μέτρο ή «μικρά» (κατ' απόλυτη τιμή) στοιχεία.

Μέθοδοι αυτής της κατηγορίας: Jacobi, Gauss–Seidel, SOR.

Μέθοδος αντίστροφου πίνακα

$$A \cdot x = b \Rightarrow A^{-1} \cdot A \cdot x = A^{-1} \cdot b \Rightarrow I \cdot x = A^{-1} \cdot b \Rightarrow x = A^{-1} \cdot b \, .$$

- Εύκολη μέθοδος στην αντίληψη, δύσκολη και χρονοβόρα στην υλοποίηση.
- Απαιτεί τον υπολογισμό του αντίστροφου πίνακα του A (αρκεί αυτός να υπάρχει).
- Δεν θα τη χρησιμοποιήσουμε για συστήματα με πλήθος εξισώσεων $n > 2$.

Μέθοδος Cramer

Ο κανόνας Cramer προσδιορίζει τη λύση του γραμμικού συστήματος $A \cdot x = b$ ως εξής:

$$x_j = \frac{\det(B_j)}{\det(A)} \ , \quad j = 1, 2, \ldots, n \ ,$$

όπου ο πίνακας B_j προκύπτει από τον A αν αντικαταστήσουμε την στήλη j του A με το διάνυσμα b.

Παρατηρήσεις

- Ο υπολογισμός των οριζουσών μπορεί να γίνει με τον ορισμό ή με μεθόδους που θα δούμε αργότερα.
- Για να είναι η μέθοδος αριθμητικά ευσταθής, χρειάζεται υπολογισμούς με μεγάλη ακρίβεια.
- Η μέθοδος απαιτεί αριθμό πράξεων της τάξης του $(n+1)!$ και γι' αυτό δεν εφαρμόζεται στην πράξη για $n > 3$.
- Έχει το πλεονέκτημα ότι μπορεί να υπολογίσει ένα ή κάποια μόνο από τα άγνωστα x_i.

Η μέθοδος της απαλοιφής Gauss αποτελείται από δύο στάδια:

1. Μετατρέπουμε με κατάλληλους μετασχηματισμούς το γραμμικό σύστημα σε *άνω τριγωνικό*:

$$\begin{array}{rcl} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{2n}x_n & = & b_2 \\ a_{33}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{3n}x_n & = & b_3 \\ \ddots \qquad\qquad\qquad \vdots & & \vdots \\ a_{n-1,n-1}x_{n-1} + a_{n-1,n}x_n & = & b_{n-1} \\ a_{nn}x_n & = & b_n\ . \end{array}$$

   Οι μετασχηματισμοί είναι τέτοιοι ώστε να διατηρούν τη λύση.

2. Επιλύουμε το άνω τριγωνικό σύστημα. Η λύση τριγωνικών συστημάτων εκφράζεται με «κλειστούς» τύπους.

Μέθοδος απαλοιφής Gauss: τριγωνοποίηση (1)

Επιτρεπτοί μετασχηματισμοί κατά την τριγωνοποίηση

Σε ένα γραμμικό σύστημα μπορούμε να εκτελέσουμε τους παρακάτω στοιχειώδεις μετασχηματισμούς χωρίς να επηρεαστεί η λύση του:

- Εναλλαγή της σειράς δύο εξισώσεων,
- Πρόσθεση σε μία εξίσωση μιας άλλης,
- Πολλαπλασιασμός μιας εξίσωσης με ένα μη μηδενικό αριθμό.

Οι δύο τελευταίοι μετασχηματισμοί έχουν ως συνέπεια ότι μπορούμε να προσθέσουμε στην εξίσωση p το πολλαπλάσιο της εξίσωσης q χωρίς να αλλάξει η λύση. Ας συμβολίσουμε αυτό το μετασχηματισμό με

$$[p] \leftarrow [p] + \lambda[q] \; .$$

Μέθοδος απαλοιφής Gauss: τριγωνοποίηση (2)

Πρώτη στήλη

Θέλουμε να μηδενίσουμε όλους τους όρους κάτω από τη διαγώνιο στην πρώτη στήλη. Γι' αυτό, επιλέγουμε την πρώτη εξίσωση και την προσθέτουμε σε κάθε επόμενη, πολλαπλασιασμένη με κατάλληλους αριθμούς. Έτσι έχουμε

$$
\begin{aligned}
[2] &\leftarrow [2] + \lambda_2[1] \,, \\
[3] &\leftarrow [3] + \lambda_3[1] \,, \\
&\vdots \\
[n] &\leftarrow [n] + \lambda_n[1] \,.
\end{aligned}
$$

Ο μετασχηματισμός σε κάθε εξίσωση $i = 2, 3, \ldots, n$ δίνει

$$
\begin{aligned}
a_{ij} &\leftarrow a_{ij} + \lambda_i a_{1j} \,, \quad j = 1, 2, \ldots, n \\
b_i &\leftarrow b_i + \lambda_i b_1 \,.
\end{aligned}
$$

Καθώς θέλουμε να έχουμε μετά το μετασχηματισμό $a_{i1} = 0$, πρέπει να ισχύει $\lambda_i = -a_{i1}/a_{11}$. Θεωρούμε ότι $a_{11} \neq 0$. Θα εξετάσουμε παρακάτω τι πρέπει να κάνουμε αν δεν ισχύει αυτό.

Συνοψίζοντας:
Μηδενίζουμε τους συντελεστές της πρώτης στήλης κάτω από τη διαγώνιο με τις εξής πράξεις:

$$
\begin{aligned}
\lambda_i &= -a_{i1}/a_{11} \\
a_{ij} &\leftarrow a_{ij} + \lambda_i a_{1j}\ , \quad j = 1, 2, \ldots, n \\
b_i &\leftarrow b_i + \lambda_i b_1\ ,
\end{aligned}
$$

για $i = 2, 3, \ldots, n$.
Το γραμμικό σύστημα θα έχει τη μορφή

$$
\begin{array}{rcl}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &=& b_1 \\
a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &=& b_2 \\
\vdots \qquad\qquad \vdots && \vdots \\
a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &=& b_n\ .
\end{array}
$$

Ας δούμε πώς μηδενίζουμε τα στοιχεία της δεύτερης στήλης, κάτω από τη διαγώνιο.
Επιλέγουμε τη *δεύτερη* γραμμή και την προσθέτουμε σε κάθε *επόμενη*, πολλαπλασιασμένη με κατάλληλους αριθμούς. Επομένως

$$\begin{aligned} [3] &\leftarrow [3] + \lambda_3 [2] \ , \\ [4] &\leftarrow [4] + \lambda_4 [2] \ , \\ &\ \ \vdots \qquad \vdots \\ [n] &\leftarrow [n] + \lambda_n [2] \ . \end{aligned}$$

Ο μετασχηματισμός σε κάθε εξίσωση $i = 3, 4, \ldots, n$ δίνει

$$\begin{aligned} a_{ij} &\leftarrow a_{ij} + \lambda_i a_{2j} \ , \quad j = 2, 3, \ldots, n \\ b_i &\leftarrow b_i + \lambda_i b_2 \ . \end{aligned}$$

Προσέξτε ότι ο δείκτης j ξεκινά από το 2 (είναι περιττό να ξεκινήσουμε από το 1 καθώς οι συντελεστές a_{i1} κάθε γραμμής i με $i = 3, 4, \ldots, n$ είναι 0).
Καθώς θέλουμε να έχουμε μετά το μετασχηματισμό $a_{i2} = 0$, προκύπτει ότι πρέπει να ισχύει $\lambda_i = -a_{i2}/a_{22}$ με $i = 3, 4, \ldots, n$.

Συνοψίζοντας, μηδενίζουμε τους συντελεστές της δεύτερης στήλης κάτω από τη διαγώνιο με τις εξής πράξεις:

$$\begin{aligned} \lambda_i &= -a_{i2}/a_{22} \\ a_{ij} &\leftarrow a_{ij} + \lambda_i a_{2j}\ , \quad j = 2, 3, \ldots, n \\ b_i &\leftarrow b_i + \lambda_i b_2\ , \end{aligned}$$

για $i = 3, 4, \ldots, n$.

Συνοψίζοντας, μηδενίζουμε τους συντελεστές της δεύτερης στήλης κάτω από τη διαγώνιο με τις εξής πράξεις:

$$
\begin{aligned}
\lambda_i &= -a_{i2}/a_{22} \\
a_{ij} &\leftarrow a_{ij} + \lambda_i a_{2j}\ , \quad j = 2, 3, \ldots, n \\
b_i &\leftarrow b_i + \lambda_i b_2\ ,
\end{aligned}
$$

για $i = 3, 4, \ldots, n$.

Γενικεύοντας τους τύπους που βγάλαμε για την πρώτη και δεύτερη στήλη μπορούμε να εξαγάγουμε τους γενικούς τύπους για κάθε στήλη, δηλαδή τον αλγόριθμο που μετατρέπει ένα γενικό γραμμικό σύστημα σε άνω τριγωνικό.

Αλγόριθμος τριγωνοποίησης

- Οι τύποι είναι

$$\begin{aligned} \lambda_i &= -a_{ik}/a_{kk} \\ a_{ij} &\leftarrow a_{ij} + \lambda_i a_{kj} \ , \quad j = k, k+1, \ldots, n \\ b_i &\leftarrow b_i + \lambda_i b_k \ , \end{aligned}$$

  με $i = k+1, \ldots, n$ (ο δείκτης i χρησιμοποιείται για να διατρέξουμε τις επόμενες εξισώσεις από την k.).
- Τις εξισώσεις αυτές θα τις εκτελέσουμε διαδοχικά για $k = 1, 2, \ldots, n-1$ (η στήλη $k = n$ δεν έχει στοιχεία κάτω από τη διαγώνιο).
- Στο τέλος της διαδικασίας, το γενικό γραμμικό σύστημα θα έχει μετατραπεί σε άνω τριγωνικό.
- Στη δεύτερη ομάδα εξισώσεων μπορούμε να παραλείψουμε την εκτέλεση για $j = k$ καθώς εκ κατασκευής θα μηδενίζουν απλά το a_{ik}.

Παρατηρήσεις

- Στην περίπτωση που κάποιος συντελεστής a_{KK} είναι ή γίνει κατά την εφαρμογή του αλγόριθμου ίσος με 0, πρέπει να εναλλάξουμε την επίμαχη εξίσωση K με κάποια από τις *επόμενές* της ώστε να έρθει στη διαγώνιο ένας μη μηδενικός συντελεστής. Κατόπιν, μπορούμε να συνεχίσουμε τη διαδικασία.
- Θα αναφέρουμε αργότερα πώς μπορούμε να επιλέξουμε την καταλληλότερη εξίσωση.
- Αν δεν μπορούμε να βρούμε μη μηδενικό συντελεστή στη στήλη K, στις επόμενες γραμμές από την γραμμή K, προχωρούμε τη διαδικασία κανονικά στο επόμενο k. Το τριγωνικό σύστημα που θα προκύψει δεν θα έχει μοναδική λύση.

Μέθοδος απαλοιφής Gauss: επίλυση τριγωνικού συστήματος (1)

Η εύρεση της λύσης ενός άνω τριγωνικού συστήματος γίνεται με τη *μέθοδο οπισθοδρόμησης*, από την *τελευταία προς την πρώτη* εξίσωση.

$$\begin{array}{rcl}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{1n}x_n & = & b_1 \\
a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{2n}x_n & = & b_2 \\
a_{33}x_3 + \cdots\cdots\cdots\cdots + a_{3n}x_n & = & b_3 \\
\ddots \qquad\qquad\qquad \vdots & & \vdots \\
a_{n-1,n-1}x_{n-1} + a_{n-1,n}x_n & = & b_{n-1} \\
a_{nn}x_n & = & b_n \ .
\end{array}$$

Έχουμε διαδοχικά για την τελευταία, προτελευταία, κλπ. πρώτη εξίσωση

$$\begin{array}{rcl}
x_n & = & \dfrac{1}{a_{nn}} b_n \ , \\
x_{n-1} & = & \dfrac{1}{a_{n-1,n-1}} \left(b_{n-1} - a_{n-1,n}x_n \right) \ , \\
\vdots & & \vdots \\
x_1 & = & \dfrac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \cdots - a_{1n}x_n \right) \ .
\end{array}$$

Αλγόριθμος

Ο γενικός τύπος είναι

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

Στον υπολογισμό του αθροίσματος χρησιμοποιούμε την ακόλουθη σύμβαση: όταν το κάτω όριο του δείκτη άθροισης είναι μεγαλύτερο από το άνω (επομένως, στην περίπτωσή μας, όταν $i = n$), το άθροισμα είναι 0.

Αλγόριθμος

Ο γενικός τύπος είναι

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

Στον υπολογισμό του αθροίσματος χρησιμοποιούμε την ακόλουθη σύμβαση: όταν το κάτω όριο του δείκτη άθροισης είναι μεγαλύτερο από το άνω (επομένως, στην περίπτωσή μας, όταν $i = n$), το άθροισμα είναι 0.

Αν κάποιος συντελεστής a_{II} είναι 0, εξετάζουμε τον αριθμητή της σχέσης (θυμηθείτε την πρωτοβάθμια εξίσωση):

- αν είναι 0, το σύστημα έχει άπειρες λύσεις. Τα x_i με $i < I$ θα εκφράζονται ως συναρτήσεις του x_I, δεν θα μπορούν να πάρουν συγκεκριμένη αριθμητική τιμή. Το x_I θα είναι ελεύθερη ποσότητα που θα μπορεί να πάρει οποιαδήποτε τιμή θέλουμε.
- αν είναι μη μηδενικός, το σύστημα δεν έχει λύση.

Μέθοδος απαλοιφής Gauss: υπολογιστικές απαιτήσεις

Απαιτήσεις μνήμης

- Ο γενικός πίνακας A χρειάζεται n^2 θέσεις μνήμης για πραγματικούς ή μιγαδικούς (όποιου τύπου είναι τα στοιχεία του).
- Επιπλέον n θέσεις απαιτεί ο b. Παρατηρήστε ότι ο b μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την αποθήκευση του διανύσματος x.

Απαιτήσεις πράξεων (χρόνου)

Η απαλοιφή Gauss χρειάζεται

- $n(n+1)/2$ διαιρέσεις,
- $n(n-1)(2n+5)/6$ πολλαπλασιασμούς και
- $n(n-1)(2n+5)/6$ αφαιρέσεις.

Συνολικά, περίπου $2n^3/3$ πράξεις, πολύ λιγότερες από τις $(n+1)!$ που απαιτεί η μέθοδος Cramer.

Μέθοδος απαλοιφής Gauss: pivoting (1)

- Το αν ένας αριθμός είναι είναι 0 στον υπολογιστή είναι σχετικό.
- Επιθυμούμε να ελαχιστοποιήσουμε τα αριθμητικά σφάλματα κατά την τριγωνοποίηση.
- Ανεξάρτητα με το αν ο διαγώνιος συντελεστής a_{kk} είναι μηδέν ή όχι, μπορούμε να επιλέξουμε το μεγαλύτερο στοιχείο κατ' απόλυτη τιμή στη στήλη k, κάτω από τη διαγώνιο. Τη γραμμή στην οποία θα το βρούμε την εναλλάσσουμε με την γραμμή k.
- Η συγκεκριμένη πράξη δεν αυξάνει ιδιαίτερα το υπολογιστικό κόστος του αλγόριθμου, ειδικά αν δεν γίνει στην πραγματικότητα η εναλλαγή στοιχείων αλλά τροποποιηθούν οι δείκτες με τους οποίους διατρέχουμε τις εξισώσεις.

Παρατηρήσεις

- Οποιοδήποτε στοιχείο σε κάποια γραμμή μπορεί να γίνει όσο μεγάλο θέλουμε αν πολλαπλασιάσουμε την εξίσωση στην οποία ανήκει με κατάλληλο αριθμό.
- Πρέπει να λαμβάνουμε υπόψη τις σχετικές τιμές των συντελεστών ως προς κάποιο "μέτρο", π.χ. το μεγαλύτερο συντελεστή της εξίσωσης στην οποία ανήκουν.
- Υπολογίζουμε κάθε φορά το μέγιστο στοιχείο των γραμμών με $i \geq k$, $M_i = \max_j |a_{ij}|$, με $j = k, \ldots, n$.
- Κατόπιν, συγκρίνουμε τα $|\bar{a}_{ik}| = |a_{ik}| / M_i$, με $i \geq k$, ώστε να βρούμε το μεγαλύτερο.
- Το υπολογιστικό κόστος αυξάνει αλλά ο αλγόριθμος γίνεται πιο ευσταθής.

Πολλαπλά δεξιά μέλη

Όταν θέλουμε να επιλύσουμε πολλές φορές το σύστημα με ίδιο πίνακα A αλλά m διαφορετικά δεξιά μέλη b, δηλαδή $b = B_{n \times m}$, είναι προτιμότερο να εκτελέσουμε συγχρόνως τη διαδικασία για όλα τα b, δηλαδή, να σχηματίσουμε ένα πίνακα B με m στήλες και να επεκτείνουμε τις πράξεις που υπαγορεύει ο αλγόριθμος για το b σε όλες τις στήλες του.

Μέθοδος Gauss–Jordan

- Το πρώτο στάδιο της μεθόδου είναι η άνω τριγωνοποίηση του πίνακα, με τη διαδικασία που είδαμε στη μέθοδο Gauss.
- Το δεύτερο στάδιο είναι η διαγωνοποίηση του πίνακα. Η διαδικασία της απαλοιφής των συντελεστών κάθε στήλης δεν περιορίζεται στις γραμμές κάτω από τη διαγώνιο αλλά εφαρμόζεται και πάνω από αυτή.

Με τη μέθοδο Gauss–Jordan ένα σύστημα της μορφής

$$A \cdot x = B$$

γίνεται

$$A' \cdot x = B' \ ,$$

όπου ο A' είναι διαγώνιος πίνακας. Με πολύ απλό μετασχηματισμό μπορεί να γίνει ο ταυτοτικός, οπότε

$$I \cdot x = B'' \ .$$

Η μέθοδος αυτή παράγει απευθείας τη λύση του συστήματος, απαιτεί όμως περίπου 50% περισσότερες πράξεις από τη μέθοδο Gauss.

Ανάλυση LU (1)

Ας υποθέσουμε ότι ο πίνακας A των συντελεστών μπορεί να γραφεί ως εξής

$$A = L \cdot U\,,$$

όπου

$$L = \begin{bmatrix} \ell_{11} & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \ell_{21} & \ell_{22} & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \ell_{n1} & \ell_{n2} & \ell_{n3} & \cdots & \ell_{nn} \end{bmatrix} \text{ και } U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}\,.$$

Άρα

$$A \cdot x = b \Rightarrow L \cdot (U \cdot x) = b\,.$$

Ανάλυση LU (2)

Στην εξίσωση

$$L \cdot (U \cdot x) = b \; ,$$

το διάνυσμα $y = U \cdot x$ μπορεί να προσδιοριστεί λύνοντας την εξίσωση $L \cdot y = b$. Καθώς ο πίνακας L είναι κάτω τριγωνικός, η λύση εύκολα δείχνεται ότι είναι

$$y_i = \frac{1}{\ell_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} \ell_{ij} y_j \right) \; , \quad i = 1, 2, \ldots, n \; .$$

Αφού προσδιορίσουμε το διάνυσμα y, η επίλυση του άνω τριγωνικού συστήματος $U \cdot x = y$ θα μας δώσει τη λύση του αρχικού. Επομένως

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