# 6. előadás

Lineáris algebra numerikus módszerei

## *Gauss-Jordan módszer*

Ugyanazzal a technikával, mint ahogy a $k$-adik oszlopban az $a_{kk}$ alatti elemeket kinulláztuk, a fölötte lévő elemeket is zérussá lehet tenni. Azaz az eliminációs fázisban $k$ minden értékére az $i$ ciklusváltozót nemcsak $k+1$-től $n$-ig, hanem 1-től $n$-ig futtathatjuk, kivéve az $i = k$ esetet. (Ez annak felel meg, mintha az $x_k$-nak az $k$-adik egyenletből való kifejezése után azt az összes többibe behelyettesítenénk.)

Az **I. fázis** végeredménye így egy diagonálmátrixú egyenletrendszer, vagyis a **II. fázis** ekkor csupán az $x_i = b_i/a_{ii}$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$ utasításokból áll (amiket menet közben, egy-egy oszlop teljes kinullázása után – vagy még előtte – azonnal is megtehetünk).

Persze, szekvenciálisan végrehajtva ez a módszer nem előnyös, hiszen jelentősen megnő a műveletek száma.
Ha viszont csak azután kezdünk a főátló fölötti elemek nullázásával foglalkozni, miután kialakítottuk a felső háromszögmátrixot, és ezt a nullázást a $k = n, n-1, \ldots, 2$ sorrendben végezzük (tehát az oszlopok szerint visszafelé haladva), akkor az $A$ mátrix elemeihez már nem kell hozzányúlni.
Ugyanis az $i$-edik sor $-l_{ik}$-szor a $k$-adik sor $(i = 1, 2, \ldots, k-1)$ elvégzése során a $k$-adik sorban az $a_{kk}$ elem kivételével minden elem (elvileg) már 0. A $k$-adik oszlopba sem kell a 0-át beírni. A **II. fázis** úgy tekinti, hogy ott zérus áll. A főátló fölötti elemek nullázása tehát nem más, mint a már tárgyalt Gauss-módszer **II. fázisa**.

Az algoritmus több, de ugyanolyan együttható mátrixú $Ax = b_j$ ($b_j \in \mathbb{R}^n$, $j = 1, 2, \dots, m$) egyenletrendszert oldjon meg.

## Főátló alatti nullázás (I. fázis):

Legyen $B = [b_1, b_2, \dots, b_m]$
Legyen $A = [A, B]$, azaz kibővítjük az $A$-t a jobboldali $b$ vektorokkal
**FOR** $k \leftarrow 1$ **TO** n-1 **DO**
// Határozzuk meg a $t$ indexet, hogy $|a_{tk}| = \max_{k \le i \le n} |a_{ik}|$.
  **IF** $k \neq t$
    cseréljük fel a $k$-adik és $t$-edik sort
  **FOR** $i \leftarrow k+1$ **TO** $n$ **DO**
    $l_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$
    **FOR** $j \leftarrow k+1$ **TO** $n+m$ **DO**
      $a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj}$

## Főátló fölötti nullázás (II. fázis):

**FOR** $k \leftarrow n$ **DOWNTO** 2 **DO**
    **FOR** $i \leftarrow 1$ TO $k-1$ **DO**
        $l_{ik} = A_{ik}/A_{kk}$
        **FOR** $j \leftarrow n+1$ TO $n+m$ **DO**
            $a_{ij} = a_{ij} - l_{ik}a_{kj}$
    **FOR** $j \leftarrow n+1$ TO $n+m$ **DO**
        $x_{k,j-n} = a_{kj}/a_{kk}$
**FOR** $j \leftarrow n+1$ TO $n+m$ **DO**
    $x_{1,j-n} = a_{1j}/a_{11}$

**Végeredmény:**

$$[x_1, x_2, \ldots, x_m] = X$$

### *Megjegyzés*

Fenti algoritmus alkalmas mátrixinvertálásra. Könnyen belátható ugyanis, hogy az $Ax = e_i$ egyenletrendszer megoldása éppen az inverz mátrix $i$-edik oszlopvektora. Ha az algoritmusban $B$ az egységmátrix, akkor a végeredmény: $X = A^{-1}$.

Legyen $N \in \mathbb{N}$ és adottak az $x_1, x_2, \ldots, x_N \in \mathbb{R}$ alappontok és az $y_1, y_2, \ldots, y_N \in \mathbb{R}$ függvényértékek (pl. mérési eredmények). Keressük azt az egyenest $y = a_0 + a_1 x$, melyre a

$$\sum_{i=0}^{N} [y_i - (a_0 + a_1 x_i)]^2$$

kifejezés minimális.

A fenti feltételnek eleget tevő egyenest az $(x_i, y_i)$ $i = i, \ldots, N$, értékeket négyzetesen legjobban közelítő egyenesnek nevezzük.

A feladat megoldásához az

$$F(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^{N} \left[ y_i - (a_0 + a_1 x_i) \right]^2 : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$$

függvényt kell minimalizálnunk. A többváltozós függvények szélsőértékéről tanultak szerint az $F'_{a_0}(a_0, a_1) = 0$ és $F'_{a_1}(a_0, a_1) = 0$ feltételnek eleget tevő $a_0, a_1$-et keressük. A parciális deriváltakra

$$\sum_{i=1}^{N} 2[y_i - (a_0 + a_1 x_i)] = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} 2[y_i - (a_0 + a_1 x_i)] x_i = 0$$

Ezt az egyenletrendszert az alábbi alakban írhatjuk:

$$\sum_{i=1}^{N} y_i - Na_0 - \sum_{i=1}^{N} a_1 x_i = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} x_i y_i - \sum_{i=1}^{N} a_0 x_i - \sum_{i=1}^{N} a_1 x_i^2 = 0$$

amelyből adódik, hogy

$$Na_0 + \left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right) a_1 = \sum_{i=1}^{N} y_i$$

$$\left(\sum_{i=1}^{N} x_i\right) a_0 + \left(\sum_{i=1}^{N} x_i^2\right) a_1 = \sum_{i=1}^{N} x_i y_i$$

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ 1 & x_2 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times 2}, \quad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N, \quad a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2.$$

Ekkor

$$A^T A = \begin{pmatrix} N & \sum_{i=1}^N x_i \\ \sum_{i=1}^N x_i & \sum_{i=1}^N x_i^2 \end{pmatrix} \qquad A^T b = \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^N y_i \\ \sum_{i=1}^N x_i y_i \end{pmatrix}$$

Így az egyenletrendszer

$$A^T A a = A^T b$$

alakban írható.

A $det(A^T A) = 0$ csak akkor teljesülhet, ha $x_1 = x_2 = \ldots = x_N$ (érdektelen eset).

Tehát feltehetjük, hogy $det(A^T A) \neq 0$. Ekkor az egyenletrendszer egyértelműen megoldható. Például az $A^T A$ invertálható, így

$$a = (A^T A)^{-1} A^T b.$$

Legyen $n, N \in \mathbb{N}$ úgy, hogy n $<<$ $N$, adottak az $x_1, x_2, \dots, x_N \in \mathbb{R}$ alappontok és az $y_1, y_2, \dots, y_N \in \mathbb{R}$ függvényértékek (pl. mérési eredmények). Keressük azt a $P_n(x) = \sum_{j=0}^{n} a_j x^j$ polinomot, melyre a

$$\sum_{j=0}^{N} (y_j - P_n(x_i))^2$$

kifejezés minimális.

A fenti feltételnek eleget tevő $P_n$ polinomot az $(x_i, y_i)$ $i = i, \dots, N$, értékeket négyzetesen legjobban közelítő $n$-ed fokú polinomnak nevezzük.

A feladat megoldásához az

$$F(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=1}^{n} \left( y_i - \sum_{j=0}^{n} a_j x_i^j \right)^2 : \mathbb{R}^{n+1} \to \mathbb{R}$$

függvényt kell minimalizálnunk. A többváltozós függvények szélsőértékéről tanultak szerint az $F'(a_0, a_1, \ldots, a_n) = 0$ feltételnek eleget tevő $a_j$-ket keressük. A parciális deriváltakra

$$\frac{\partial F}{\partial a_j}(a_0, a_1, \ldots, a_n) = \sum_{i=1}^{N} 2(y_i - P_n(x_i)) \left( -\frac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) \right) = 0$$

$(j = 0, 1, \ldots, n)$.

$$\sum_{i=1}^{N} P_n(x_i)\frac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) = \sum_{i=1}^{N} y_i \frac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) \qquad (j = 0, 1, \ldots, n).$$

Mivel $\dfrac{\partial P_n}{\partial a_j}(x_i) = (x_i)^j$, a fenti egyenlet a következő alakba írható:

$$\sum_{i=1}^{N}(x_i)^j \sum_{k=0}^{n} a_k (x_i)^k = \sum_{k=0}^{n} a_k \sum_{i=1}^{N}(x_i)^{j+k} = \sum_{i=1}^{N} y_i (x_i)^j$$

$(j = 0, 1, \ldots, n)$. Ezzel $a_k$ -kra egy lineáris egyenletrendszert kaptunk ($n+1$ darab egyenlet, $n+1$ darab ismeretlennel).

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_N & \dots & x_N^n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{N\times(n+1)},$$

$$b = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^N, \qquad a = \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+1}.$$

Ekkor az egyenletrendszer

$$A^T A a = A^T b$$

alakban írható.

Az $f$ függvény helyettesítésére (közelítésére) a szóba jöhető, előre rögzített $H$ függvényosztályból azt a $h \in H$ függvényt keressük, amely az

$$\|f - h\| \to \min, \qquad h \in H$$

feltételes szélsőérték feladat megoldása. Tulajdonképpen minden $h \in H$ tekinthető közelítésnek, ezért a feladatot kielégítő függvényt szokás legjobb approximációnak nevezni.

Függvények $[a, b]$ intervallumon való legkisebb négyzetes közelítéséről akkor beszélünk, ha a norma diszkrét esetben $(a \leq x_1 < x_2 < \ldots < x_m \leq b)$

$$\|f\|_2 = \left( \sum_{i=1}^{m} f^2(x_i)\, w(x_i) \right)^{\frac{1}{2}},$$

folytonos esetben pedig

$$\|f\|_2 = \left( \int_a^b f^2(x)\, w(x)\, dx \right)^{\frac{1}{2}},$$

ahol a rögzített $w(x)$ súlyfüggvényre diszkrétnél a $w(x_i) > 0$ $(i = 1, 2, \ldots m)$, folytonosnál pedig a $w(x) \in C[a, b]$, $w(x) > 0$, $\forall x \in [a, b]$ teljesülését megköveteljük. Fontos speciális eset a $w(x) \equiv 1$.

## *Lineáris eset*

Legyen a $H$ függvényhalmaz olyan, hogy ismert

$$\phi_i : [a, b] \to \mathbb{R}(i = 1, \ldots, n)$$

függvények valamennyi lineáris kombinációját tartalmazza, tehát a $h\left(x\right)$ függvény alakja

$$h(x) = a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + \ldots + a_n\phi_n(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i\phi_i(x).$$

A $\phi_i$ függvényeket **alapfüggvényeknek** vagy másképpen **bázisfüggvényeknek** nevezzük.

### Diszkrét, lieáris eset

Fontos kérdés az approximációs feladat megoldásának létezése és egyértelműsége. Lineáris approximációra igaz az alábbi állítás.

### Tétel

Ha $\{\phi_i\}_{i=1}^n \subset C\,[a, b]$ lineárisan függetlenek, akkor bármilyen normában és minden $f \in C\,[a, b]$ esetén létezik legjobban közelítő $h(x) = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i(x)$ függvény.

## *Diszkrét, lineáris eset*

Legyen $F = F(a_0, a_1 \ldots, a_n)$. Ekkor meg kell oldani a

$$F = \sum_{i=i}^{m} \left[ f(x_i) - \left( a_1\phi_1(x_i) + \ldots + a_j\phi_j(x_i) + \ldots + a_n\phi_n(x_i) \right) \right]^2 \to \min$$

szélsőértékfeladatot. Ennek megoldása pedig $\dfrac{\partial F}{\partial a_j} = 0$, $(j = 1, 2, \ldots, n)$, vagyis a

$$-2 \sum_{i=i}^{m} \left[ f(x_i) - (a_1\phi_1(x_i) + \ldots + a_j\phi_j(x_i) + \ldots + a_n\phi_n(x_i) \right] \phi_j(x_i) = 0$$

lineáris egyenletrendszer megoldása. (Az egyenlet teljesülése az approximációs feladat megoldásának már említett egyértelmű létezése miatt elegendő.)

## *Diszkrét, lineáris eset*

Egyszerűsítés és a szokásos alakra való rendezés után kapjuk, hogy

$$a_1 \sum_{i=i}^{m} \phi_1(x_i)\phi_j(x_i) + \ldots + a_n \sum_{i=i}^{m} \phi_n(x_i)\phi_j(x_i) = \sum_{i=i}^{m} f(x_i)\phi_j(x_i)$$

$(j = 1, 2, \ldots, n)$. Vezessük be az

$$\langle u, v\rangle = \sum_{i=i}^{m} u(x_i)v(x_i)w(x_i)$$

jelölést.

### *Diszkrét, lineáris eset*

Ezzel az egyenletrendszer alakja a következő:

$$
\begin{aligned}
a_1 \langle \phi_1, \phi_1 \rangle + a_1 \langle \phi_2, \phi_1 \rangle + \ldots + a_n \langle \phi_n, \phi_1 \rangle &= \langle f, \phi_1 \rangle \\
a_1 \langle \phi_1, \phi_2 \rangle + a_1 \langle \phi_2, \phi_2 \rangle + \ldots + a_n \langle \phi_n, \phi_2 \rangle &= \langle f, \phi_2 \rangle \\
&\vdots \\
a_1 \langle \phi_1, \phi_n \rangle + a_1 \langle \phi_2, \phi_n \rangle + \ldots + a_n \langle \phi_n, \phi_n \rangle &= \langle f, \phi_n \rangle
\end{aligned}
$$

## Megjegyzések

A

$$\langle u, v\rangle = \sum_{i=i}^{m} u(x_i)v(x_i)w(x_i)$$

összefüggéssel egy skaláris szorzatot definiáltunk a diszkrét pontokon értelmezett függvények között. Ez két $\mathbb{R}^n$-beli vektornak a szorzata (ha $w(x) \equiv 1$).

Az egyenletrendszer az úgynevezett normálegyenletrendszer. A $G = [\langle\phi_j, \phi_i\rangle]_{i,j=1}^{n}$ , $a = [a_1, \ldots, a_n]^T$ és a $b = [\langle f, \phi_1\rangle, \ldots, \langle f, \phi_n\rangle]^T$ jelölésekkel tömörebben:

$$Ga = b.$$

A $G \in \mathbb{R}^{n\times n}$ mátrixot Gram-mátrixnak nevezzük.

## Diszkrét, lineáris eset

Legyen $A = [\phi_j(x_i)]_{i,j=1}^{m,n} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $a = [a_1, \ldots, a_n]^T \in \mathbb{R}^n$, $b = y = [y_1, \ldots, y_m]^T \in \mathbb{R}^m$ és $m > n$.
Keresünk olyan $a^*$ paramétervektort, amely az $Aa - b$ hibát valamilyen normában minimalizálja. Ha létezik a $Aa = b$ egyenletnek megoldása, akkor a minimumfeladat egyenértékű vele.
Az euklideszi normában megfogalmazott

$$\|Aa - b\|_2 \to \min .$$

minimumfeladat megoldása az alábbi tétel:

## Tétel

Az $a \in R^n$ akkor és csak akkor megoldása a feladatnak, ha

$$A^T Aa = A^T b.$$