

4. előadás

Lineáris algebra numerikus módszerei

A Gauss-módszer két fázisból áll.

I. Azonos (a megoldást őrző) átalakításokkal az $Ax = b$ egyenletrendszert felső háromszög alakúra hozzuk:

II. A kapott felső háromszögmátrixú egyenletrendszert megoldjuk.

Az I. lépés: felső felső háromszög alakúra hozás

Általános (k -adik) lépés: minden $i = k + 1, \dots, n$ és $j = k, \dots, n$ esetén

$$l_{ik} = a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)}$$

$$b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik} b_k^{(k)}$$

Tekintsük az $Ax = b$ egyenletrendszert, ahol $A = [a_{ij}]_{i,j=1}^n \in \mathbb{R}^{n \times n}$ felső háromszögmátrix. Ekkor

$$\begin{array}{cccccc}
 a_{11}x_1 + & \dots & + a_{1j}x_j + & \dots & + a_{1n}x_n & = & b_1 \\
 & \ddots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\
 & & a_{ij}x_j + & \dots & + a_{in}x_n & = & b_i \\
 & & & \ddots & \vdots & & \vdots \\
 & & & & a_{nn}x_n & = & b_n
 \end{array}$$

Az egyenletrendszer akkor és csak akkor oldható meg egyértelműen, ha $a_{11} \neq 0, \dots, a_{nn} \neq 0$, azaz $\det(A) \neq 0$. Ezen egyenletrendszer megoldását adja a következő algoritmus:

- 1 $x_n = b_n / a_{nn}$
- 2 **FOR** $i \leftarrow n - 1$ **DOWNTO** 1
- 3 $x_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j \right) / a_{ii}$

A Gauss-módszer algoritmus

I. (eliminációs) fázis:

```
1  FOR  $k \leftarrow 1$  TO  $n - 1$ 
2      FOR  $i \leftarrow k + 1$  TO  $n$ 
3           $l_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$ 
4           $b_i = b_i - l_{ik} b_k$ 
5          FOR  $j \leftarrow k$  TO  $n$ 
6               $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - l_{ik} a_{kj}$ 
```

A Gauss-módszer algoritmus

II. (visszahelyettesítő) fázis:

```
1  $x_n = b_n/a_{nn}$ 
2 FOR  $i \leftarrow n - 1$  DOWNTO 1
3      $s \leftarrow 0$ 
4     FOR  $j \leftarrow i + 1$  TO  $n$ 
5          $s \leftarrow s + a_{ij}x_j$ 
6      $x_i \leftarrow (b_i - s) / a_{ii}$ 
```

Alkalmazás a determináns kiszámítására.

Ismeretes, hogy a determináns értéke nem változik, ha bármely sorához hozzáadjuk egy másik sor akárhányszorosát. Mivel a fenti eljárás közben csak ilyen átalakításokat hajtunk végre a mátrixon (és így a determinánsán is), a determináns marad az eredeti. Azt tehát a végén a főátlóbeli elemek szorzata adja.

A Gauss-módszer véges sok lépésben, véges sok aritmetikai alpművelet ($+$, $-$, $*$, $/$) elvégzése után megadja az $Ax = b$ ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$) egyenletrendszer megoldását. A szükséges aritmetikai műveletszám (műveletigény) az egyenletrendszer-megoldó eljárások fontos minőségi jellemzője, mert az ilyen algoritmusok számítógépidéje nagyjából arányos az aritmetikai műveletigénnyel (a kerekítési hibák halmozódása is – bár ez konkrét esetekben nem törvényszerű – kedvezőtlenebb lehet nagyobb műveletszám esetén). A műveletigényt szokás az algoritmus költségének is nevezni, ennek megfelelően beszélhetünk *olcsó*, illetve *drága* eljárásokról.

Számláljuk össze a Gauss-módszer által igényelt additív és multiplikatív műveleteket. Jelöljük az additív műveleteket A -val, a multiplikatívakat pedig M -mel. (A hagyományos felépítésű számítógépeknél az összeadás és a kivonás nagyjából egyező időigényű, tőlük nagyobb, de egymás között szintén azonosnak vehető a szorzás és az osztás időigénye; indokolt tehát a műveletek ilyen szempontból két csoportba való sorolása.)

Az I. fázis k -adik lépésében a műveletek és műveletszámok a következők:

```

1  FOR  $k \leftarrow 1$  TO  $n - 1$ 
2      FOR  $i \leftarrow k + 1$  TO  $n$ 
3           $l_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$   $M$ 
4           $b_i = b_i - l_{ik} b_k$   $(M + A)$ 
5          FOR  $j \leftarrow k$  TO  $n$ 
6               $a_{ij} \leftarrow a_{ij} - l_{ik} a_{kj}$   $(M + A)$ 

```

A legbelső ciklusmag $(n - k + 1)$ -szor, a második $(n - k)$ -szor fut le kapjuk:

$$((n - k)(n - k + 1) + 2(n - k)) M$$

$$((n - k)(n - k + 1) + (n - k)) A.$$

Mint ahogy ez a belső ciklusok a külső ciklus $k = 1, \dots, n - 1$ lépéseire fut le, ki kell számolni a

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

és

$$\sum_{k=1}^{n-1} ((n-k)(n-k+1) + (n-k)) A$$

összegeket. Ismert azonosságok felhasználásával adódik az

$$\left(\frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{4}{3}n \right) M + \left(\frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5}{6}n \right) A.$$

A II. fázis műveletigénye hasonló számítással:

```

1   $x_n = b_n / a_{nn}$   $M$ 
2  FOR  $i \leftarrow n - 1$  DOWNTO 1
3       $s \leftarrow 0$ 
4      FOR  $j \leftarrow i + 1$  TO  $n$ 
5           $s \leftarrow s + a_{ij}x_j$   $(M + A)$ 
6       $x_i \leftarrow (b_i - s) / a_{ii}$   $(M + A)$ 

```

Összegezve az $i = n - 1, n - 2, \dots, 1$ lépések műveletigényét, kapjuk, hogy a II. fázis összköltsége

$$M + \sum_{i=1}^{n-1} ((n-i)(M+A) + (M+A)) = \begin{cases} \left(\frac{n^2}{2} + \frac{n}{2} + 1\right) M \\ \left(\frac{n^2}{2} + \frac{n}{2}\right) A. \end{cases}$$

Az I. és II. fázis költségét összeadva kapjuk a Gauss-módszer számítási összköltségét:

$$\left(\frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{4}{3}n + \frac{n^2}{2} + \frac{n}{2} + 1\right) M = \left(\frac{n^3}{3} + \frac{3}{2}n^2 - \frac{11}{6}n + 1\right) M$$

$$\left(\frac{n^3}{3} + \frac{n^2}{2} - \frac{5}{6}n + \frac{n^2}{2} + \frac{n}{2}\right) A = \left(\frac{n^3}{3} + n^2 - \frac{1}{3}n\right) A.$$

Aritmetikai műveleteket használó akármely véges algoritmus lényeges jellemzője a végrehajtásához szükséges aritmetikai műveletek száma, természetesen a feladat paramétereinek (pl. ismeretlenek száma, együttható mátrix mérete, stb.) függvényében. A régebbi számítógépek esetén a multiplikatív műveletek végrehajtási ideje lényegesen nagyobb volt, mint az additívaké. Ezért ezeket külön határozták meg. Később megfigyelték, hogy a lineáris algebra számítási eljárásaiban az additív és a multiplikatív műveletek száma nagyon gyakran közel azonos. Ezért alkották meg a számítási igény mérésére a *flop* fogalmát.

Definíció

1 **régi flop** az a számítási munka, amely az $s = s + x * y$ művelet (1 összeadás + 1 szorzás) elvégzéséhez kell. 1 **új flop** pedig az a számítási munka, amely egyetlen (mindegy, hogy additív vagy multiplikatív) aritmetikai művelet elvégzéséhez szükséges.



Az új flop bevezetését az indokolja, hogy az újabb számítógépeken a multiplikatív és az additív műveletek ideje azonosnak tekinthető. Tehát egy régi flop 2 új floppal azonos a mai számítógépeken. Figyelembe véve mindezeket, valamint, hogy nagy n -ekre a legmagasabb fokú tag válik dominánssá, kimondhatjuk a Gauss-módszer műveletigényéről szóló tételt.

Tétel

A Gauss-módszer $\frac{n^3}{3} + O(n^2)$ additív és ugyanennyi multiplikatív műveletet igényel, azaz összességében a műveletigénye $\frac{n^3}{3} + O(n^2)$ régi és $\frac{2n^3}{3} + O(n^2)$ új flop.

A Gauss-módszer I. fázisában előfordulhat, mondjuk a k -adik lépésben, hogy az a_{kk} elem zérus. Például a

$$\begin{array}{rccccrcr} & & & 4x_2 & + & x_3 & = & 9 \\ x_1 & + & x_2 & + & 3x_3 & = & 6 \\ 2x_1 & - & 2x_2 & + & x_3 & = & -1 \end{array}$$

rendszernél $a_{11} = 0$. Ilyen esetekben a sorok, vagy az oszlopok felcserélésével megkísérelhetjük elérni, hogy az a_{kk} helyére zérustól különböző elem kerüljön. A fenti esetben például az első és harmadik sor felcserélésével kapjuk, hogy

$$\begin{array}{rccccrcr} 2x_1 & - & 2x_2 & + & x_3 & = & -1 \\ x_1 & + & x_2 & + & 3x_3 & = & 6 \\ & & 4x_2 & + & x_3 & = & 9 \end{array}$$

Az első és második oszlop oszlop cseréjével pedig azt kapjuk, hogy

$$\begin{array}{rccccrcr} 4x_2 & & & + & x_3 & = & 9 \\ x_2 & + & x_1 & + & 3x_3 & = & 6 \\ 2x_2 & - & 2x_1 & + & x_3 & = & -1 \end{array}$$

A sorok cseréjénél az egyenletek (és b megfelelő komponenseinek) sorrendje, az oszlopok cseréjénél pedig a változók sorrendje változik meg. Általában, így az előző példában is, több választási lehetőségünk is van sor-, vagy oszlopcsere. Ha azonban az $a_{kk} = 0$ elem alatt a többi együttható is zérus, akkor az $[a_{ij}]_{i,j=1}^{n,k}$ részmatrix oszlopai lineárisan összefüggők, A szinguláris és az eliminációs eljárás sorcserével sem folytatható. Hasonló a helyzet, ha a_{kk} és a sorában, tőle jobbra, minden együttható zérus, mert A ekkor is szinguláris.

A sorok felcserélését úgy, hogy az új pivot elem zérustól különböző legyen, **pivotálásnak** vagy **főelemkiválasztásnak** nevezzük. A pivot elem megválasztása nagymértékben befolyásolja az eredmények a numerikus stabilitást.

Általában is igaz, hogy a közelítő megoldás pontosságát nagymértékben javítja a helyesen megválasztott pivotálás. Pivot elemnek nagy abszolút értékű elemet kell választani. Két alapvető pivotálási stratégiát használunk.

Részleges főelemkiválasztás:

A k -adik lépésben a k -adik oszlop a_{jk} ($k \leq j \leq n$) elemei közül kiválasztjuk a maximális abszolút értékűt. Ha ennek indexe i , akkor a k -adik és az i -edik sort felcseréljük. A pivotálás után teljesül, hogy

$$|a_{kk}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|.$$

A részleges elnevezést az indokolja, hogy csak az aktuális oszlopbeli, szóba jöhető elemek közül választjuk ki a legnagyobb abszolút értékűt.

Teljes főelemkiválasztás:

A k -adik lépésben az a_{ij} ($k \leq i, j \leq n$) mátrixelemek közül választjuk ki a maximális abszolút értékűt. Ha ennek indexe (i, j) , akkor a k -adik és az i -edik sort, valamint a k -adik oszlopot és j -edik oszlopot felcseréljük. A pivotálás után teljesül, hogy

$$|a_{kk}| = \max_{k \leq i, j \leq n} |a_{ij}|.$$

(megjegyezzük, hogy **oszlopcsere** esetén **változócsere** is történik.)

Megjegyzés

Ha determinánst számolunk pivotálással, akkor figyelemmel kell követnünk a sor- és az oszlopcserek számát. Egy sor- vagy oszlopcsere ugyanis a determináns előjelét megváltoztatja. Tehát a végső háromszögmátrix főátlóbeli elemeinek szorzatát még -1 -gyel szorozni kell, amennyiben páratlan számú cserét hajtottunk végre.

Megjegyzés

A főelemkiválasztásos Gauss-módszer esetén az I. fázis minden lépésében pivotálást hajtunk végre. A teljes főelemkiválasztást biztonságos (numerikusan stabil) stratégiának tekinthetjük. A részleges főelemkiválasztás egyéb technikákkal kiegészítve ugyancsak biztonságosnak tekinthető. Éppen ezért a teljes főelem kiválasztás árát nem éri meg megfizetni. (A nagyság szerinti összehasonlítás is műveletet igényel; rendszerint különbségképzést és az eredmény előjel-bitjének figyelését. Ehhez jön még a többszöri abszolút érték-képzés és a nagyobb adatmozgatás.) A részleges főelemkiválasztás lényegesen kevesebb pótlólagos aritmetikai műveletet igényel mint a teljes főelemkiválasztás. A gyakorlatban tehát legtöbbször csak részleges főelem kiválasztást alkalmazunk, de azt – néhány kivételtől eltekintve – mindig!

Vannak a gyakorlatban többször előforduló, fontos esetek, amikor nem kell pivotálni, az eljárás főelemkiválasztás nélkül is stabilan viselkedik. Ezek a következők:

- Az A mátrix szimmetrikus és pozitív definit.
- Az A mátrix diagonálisan domináns a következő értelemben:

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \quad (1 \leq i \leq n).$$

A pozitív definitesség fogalma pedig a következő.

Definíció

Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix pozitív definit, ha $\forall x \in \mathbb{R}^n, x \neq 0$ esetén $x^T A x > 0$.