9. gyakorlat
Lineáris egyenletrendszerek megoldási módszerei folyt.

Néhány kiegészítés a Gauss- és a Gauss–Jordan-eliminációhoz

1. Mindkét eliminációs módszer műveletigénye sokkal kisebb, mint a Cramer-szabályé: egy n-ismeretlenes egyenletrendszernél a Gauss-elimináció során hozzávetőlegesen $n^3/3$, a Gauss–Jordan-eliminációnál $n^3/2$ darab szorzást (vagy osztást) kell elvégezni.

2. A Gauss-eliminációt időnként az ún. **főelem-kiválasztás** módszerével kombináljuk. Láthattuk, hogy a szabályos Gauss-eliminációs algoritmus során az aktuális táblázat i-edik oszlopában általános esetben úgy tudjuk nullára transzformálni az a_{ii} alatti elemeket, hogy az i-edik sort először elosztjuk a_{ii}-vel, majd az így kapott sor megfelelő számszorosát kivonjuk vagy hozzáadjuk a lejjebb lévő sorokhoz. Mivel kis számmal való osztásnál nagy lehet a kerekítési hiba hatása, ezért kedvezőtlen, ha az a_{ii} elem kis abszolút értékű. Ennek elkerülésére szolgál a főelem-kiválasztás.

A **részleges főelem-kiválasztás** során megvizsgáljuk, hogy az adott oszlopban a főátló alatt van-e a főátlóbeli elemnél nagyobb abszolút értékű szám, és ha igen, akkor sorcserével a főátlóba hozzuk.
Alább láthatunk egy példát részleges főelem-kiválasztásra. Mielőtt nullára transzformálnánk a 2. oszlopban lévő elemeket a főátló alatt, felcseréljük a 2. és a 3. sort. Ezzel a főátlóba kerül az oszlop legnagyobb abszolút értékű főátló alatti eleme.

$$\left[\begin{array}{cccr|r} 2 & 3 & 6 & 2 & 7 \\ 0 & \mathbf{1} & 5 & 4 & 1 \\ 0 & \underline{\mathbf{5}} & 5 & 10 & -15 \\ 0 & \mathbf{3} & 2 & 5 & -9 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{cccr|r} 2 & 3 & 6 & 2 & 7 \\ 0 & \underline{5} & 5 & 10 & -15 \\ 0 & 1 & 5 & 4 & 1 \\ 0 & 3 & 2 & 5 & -9 \end{array}\right]$$

Még jobban csökkenthető a számítási hiba a **teljes főelem-kiválasztás**sal. Ilyenkor a táblázatnak a főátlóbeli elemből jobbra és lefelé kiinduló legnagyobb négyzetes blokkjában keressük a legnagyobb abszolút értékű elemet (főelem). Ennek főátlóba hozásához esetleg sor- és oszlopcserét is végre kell hajtanunk. Az utóbbinál arra kell vigyázni, hogy megváltozik az oszlopok számozása. (Pl. ha a 4. oszlopot áthozzuk a 2. oszlopba, akkor onnantól kezdve a 2. oszlop az x_4 ismeretlen együtthatóit fogja tartalmazni!)
Alább láthatunk egy példát teljes főelem-kiválasztásra. Megkeressük a legnagyobb abszolút értékű elemet a vastagon szedett blokkban. Ezt úgy hozhatjuk a főátlóba, hogy felcseréljük a 2. és a 3. sort, majd a 2. és a 4. oszlopot. Mostantól a 2. oszlop tartalmazza

az x_4 együtthatóit, és a 4. oszlop az x_2 együtthatóit.

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 3 & 6 & 2 & 7 \\ 0 & \mathbf{1} & \mathbf{5} & \mathbf{4} & 1 \\ 0 & \mathbf{5} & \mathbf{5} & \underline{\mathbf{10}} & -15 \\ 0 & \mathbf{3} & \mathbf{2} & \mathbf{5} & -9 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 3 & 6 & 2 & 7 \\ 0 & 5 & 5 & \underline{10} & -15 \\ 0 & 1 & 5 & 4 & 1 \\ 0 & 3 & 2 & 5 & -9 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{cccc|c} 2 & 2 & 6 & 3 & 7 \\ 0 & \underline{10} & 5 & 5 & -15 \\ 0 & 4 & 5 & 1 & 1 \\ 0 & 5 & 2 & 3 & -9 \end{array}\right]$$

Pontos számolásnál a főelem-kiválasztásnak természetesen nincs jelentősége.

3. Felbontási (faktorizációs) eljárások

Faktorizációról akkor beszélünk, ha egy mátrixot két mátrix szorzatára bontunk. Tegyük fel, hogy az egyenletrendszer $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ együtthatómátrixa felírható

$$A = B \cdot C, \quad B, C \in \mathbb{R}^{n\times n}$$

alakban. Ekkor az $A\underline{x} = \underline{b}$ egyenletrendszer másképpen $(B \cdot C)\underline{x} = \underline{b}$, azaz $B(C\underline{x}) = \underline{b}$. Jelölje a $C\underline{x}$ szorzatot $\underline{y}$. Így az $A\underline{x} = \underline{b}$ egyenletrendszer megoldása ekvivalens a

$$B\underline{y} = \underline{b}$$

és a

$$C\underline{x} = \underline{y}$$

egyenletrendszer egymás utáni megoldásával.
Nyilvánvalóan ennek csak akkor van értelme, ha a két rendszert könnyebb megoldani, mint az eredeti egyenletrendszert, azaz ha B és C „jó struktúrájú" mátrixok. Ez a helyzet például, ha háromszögmátrixokról van szó. Különösen akkor előnyös faktorizációs módszert alkalmazni, ha ugyanazon együtthatómátrixszal, de különböző alkalmakkor, különböző jobb oldalakkal is meg akarjuk oldani az egyenletrendszert. Az eljárás legszámításigényesebb része ugyanis a felbontás (B és C kiszámítása), amit ha egyszer már kiszámítottunk és elraktároztunk, akkor bármikor felhasználhatjuk. (A B és C mátrix ismeretében a fenti két egyenletrendszer már könnyen megoldható.)

A következőkben két konkrét faktorizációs módszert ismertetünk.

1. LU-felbontás. Ennek a felbontási módszernek az a lényege, hogy az A mátrixot $L \cdot U$ alakban írjuk fel, ahol L a főátlóban egyeseket tartalmazó alsóháromszög-mátrix, U pedig felsőháromszög-mátrix (a főátlóban nem feltétlenül egyesekkel). Ekkor a megoldandó egyenletrendszerek:

$$L\underline{y} = \underline{b}$$

és

$$U\underline{x} = \underline{y}.$$

Az L és U meghatározásához jelölje a két mátrix kiszámítandó elemeit l_{ij} ill. u_{ij}. Annak kell teljesülnie, hogy a mátrixszorzást elvégezve az A mátrixot kapjuk, azaz fennálljon a

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

mátrixegyenlőség. A bal oldalon elvégezzük a szorzást, és az elemeket egyenlővé tesszük az A mátrix megfelelő elemeivel.

Példa. Oldjuk meg LU-felbontással a

$$\begin{array}{rrrcl} 2x_1 & +x_2 & +x_3 & = & 4 \\ x_1 & +3x_2 & +2x_3 & = & 6 \\ x_1 & +2x_2 & +2x_3 & = & 5 \end{array}$$

egyenletrendszert.

Megoldás: Először meghatározzuk az

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

együtthatómátrix LU-felbontását. Az

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

egyenlőségnek kell fennállnia. A szorzatmátrix első oszlopát az A első oszlopával összehasonlítva az

$$u_{11} = 2,$$

$$l_{21}u_{11} = 1, \quad \text{azaz} \quad l_{21} = \frac{1}{2},$$

$$l_{31}u_{11} = 1, \quad \text{vagyis} \quad l_{31} = \frac{1}{2}$$

összefüggések adódnak. A második oszlopaik összehasonlításából

$$u_{12} = 1,$$

$$l_{21}u_{12} + u_{22} = 3, \quad \text{azaz} \quad u_{22} = 3 - \frac{1}{2} \cdot 1 = \frac{5}{2},$$

$$l_{31}u_{12} + l_{32}u_{22} = 2, \quad \text{vagyis} \quad l_{32} = \frac{2}{5} \cdot \left(1 - \frac{1}{2} \cdot 1\right) = \frac{3}{5},$$

és végül a harmadik oszlopaik összehasonlításából azonnal adódik, hogy

$$u_{13} = 1,$$

$$l_{21}u_{13} + u_{23} = 2, \quad \text{amiből} \quad u_{23} = \frac{3}{2},$$

$$l_{31}u_{13} + l_{32}u_{23} + u_{33} = 2, \quad \text{vagyis} \quad u_{33} = \frac{3}{5}.$$

A keresett tényezők tehát

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{3}{5} & 1 \end{bmatrix} \qquad \text{és} \qquad U = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & \frac{5}{2} & \frac{3}{2} \\ 0 & 0 & \frac{3}{5} \end{bmatrix}.$$

Az $L\underline{y} = \underline{b}$ egyenletrendszer a következő:

$$\begin{array}{llllll} y_1 & & & = & 4 \\ \frac{1}{2}y_1 & +y_2 & & = & 6 \\ \frac{1}{2}y_1 & +\frac{3}{5}y_2 & +y_3 & = & 5 \end{array}$$

Az első, a második és a harmadik egyenletből

$$y_1 = 4, \quad y_2 = 4, \quad y_3 = \frac{3}{5}.$$

Végül az $U\underline{x} = \underline{y}$, azaz a

$$\begin{array}{lllll} 2x_1 & +x_2 & +x_3 & = & 4 \\ & +\frac{5}{2}x_2 & +\frac{3}{2}x_3 & = & 4 \\ & & +\frac{3}{5}x_3 & = & \frac{3}{5} \end{array}$$

egyenletrendszer megoldása az utolsó egyenletből kiindulva:

$$x_3 = 1, \quad x_2 = 1, \quad x_1 = 1.$$

2. Cholesky-felbontás. Ez a módszer akkor használható, ha A szimmetrikus, pozitív definit mátrix. A pozitív definitség azt jelenti, hogy az $(A\underline{x}) \cdot \underline{x}$ skaláris szorzat semmilyen $\underline{x}$ vektorra nem negatív, és csak akkor nulla, ha $\underline{x} = \underline{0}$. Egy szimmetrikus mátrix pozitív definit, ha az összes bal felső sarokaldeterminánsa pozitív. Ilyenkor A felírható $L \cdot L^T$ alakban, ahol L alsóháromszög-mátrix. Ekkor a megoldandó egyenletrendszerek:

$$L\underline{y} = \underline{b}$$

és

$$L^T \underline{x} = \underline{y}.$$

Pl. Adjuk meg az

$$A = \begin{bmatrix} 9 & 6 & 3 \\ 6 & 5 & 3 \\ 3 & 3 & 6 \end{bmatrix}$$

mátrix Cholesky-felbontását! Oldjuk meg az $A\underline{x} = \underline{b}$ egyenletrendszert, ahol $\underline{b} = (1, 1, 1)^T$.
Megoldás: A

$$\begin{bmatrix} 9 & 6 & 3 \\ 6 & 5 & 3 \\ 3 & 3 & 6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ 0 & l_{22} & l_{32} \\ 0 & 0 & l_{33} \end{bmatrix}$$

mátrixegyenlőségből:

$$l_{11}^2 = 9 \rightarrow l_{11} = 3 \quad \text{(-3 is választható)}$$

$$l_{21}l_{11} = 6 \;\Rightarrow l_{21} = 2, \quad l_{31}l_{11} = 3 \;\Rightarrow l_{31} = 1$$

$$l_{21}^2 + l_{22}^2 = 5 \;\Rightarrow l_{22}^2 = 1 \;\Rightarrow l_{22} = 1 \text{ (vagy -1)}$$

$$l_{31}l_{21} + l_{32}l_{22} = 3 \;\Rightarrow l_{32} = 1$$

$$l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 = 6 \;\Rightarrow l_{33}^2 = 4 \;\Rightarrow l_{33} = 2 \text{ (vagy -2)}$$

Tehát

$$L = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \quad \text{és} \quad L^T = \begin{bmatrix} 3 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

1. lépés: Megoldjuk az $L\underline{y} = \underline{b}$ egyenletrendszert:

$$\left.\begin{array}{llll} 3y_1 & & = & 1 \\ 2y_1 & +y_2 & = & 1 \\ y_1 & +y_2 & +2y_3 = & 1 \end{array}\right\} \Rightarrow y_1 = \frac{1}{3},\ y_2 = \frac{1}{3},\ y_3 = \frac{1}{6}$$

2. lépés: Megoldjuk az $L^T\underline{x} = \underline{y}$ egyenletrendszert:

$$\left.\begin{array}{rrrcc} 3x_1 & +2x_2 & +x_3 & = & \frac{1}{3} \\ & x_2 & +x_3 & = & \frac{1}{3} \\ & & 2x_3 & = & \frac{1}{6} \end{array}\right\} \Rightarrow x_3 = \frac{1}{12},\ x_2 = \frac{1}{4},\ x_1 = -\frac{1}{12}$$