3. A Gauss-elimináció és az LU-felbontás algoritmusa

A) Vázolja a Gauss-elimináció alapötletét LER megoldására, vezesse le az algoritmus képleteit. Mutassa be a Gauss-elimináció további alkalmazásait azonos mátrixú lineáris egyenletrendszerek megoldására, determináns kiszámítására és inverzmátrix meghatározására.

Direkt módszer, mely pontosan számszerűen véges sok lépésben megadja az eredményt.

Alapötlet:

Legyen $a_{in+1} := b_i$, azaz $[A|b]$ a tárolási forma.
GE := Gauss-elimináció.

$$A^{(0)} := \left[\begin{array}{cccc|c} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & a_{1n+1} = b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & a_{2n+1} = b_2 \\ \vdots & & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} & a_{nn+1} = b_n \end{array}\right]$$

Célunk: A LER-t egyszerűbb alakra hozni:

1. balról jobbra: a főátló alatt kinullázzuk az elemeket, „előre", GE
2. jobbról balra: a főátló fölött nullázunk, „vissza", visszahelyettesítés

Levezetés:

Az 1. egyenletet változatlanul hagyjuk.

Ha $a_{11}^{(0)} \neq 0$, akkor az i-edik egyenletből $(i = 2, 3, \ldots, n)$ kivonjuk az 1. egyenlet $\left(\frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}}\right)$-szeresét: hogy $a_{i1}^{(0)}$ kinullázódjon.
($\rightsquigarrow$ elimináció, kiküszöbölés)

$$A^{(1)} = \left[\begin{array}{ccccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & a_{1n+1}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & a_{2n+1}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} & a_{nn+1}^{(1)} \end{array}\right],$$

ahol

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - \frac{a_{i1}^{(0)}}{a_{11}^{(0)}} \cdot a_{1j}^{(0)} \qquad (i = 2, \ldots, n;\ j = 2, \ldots, n, n+1).$$

Az 1. és 2. egyenletet változatlanul hagyjuk.

Ha $a_{22}^{(1)} \neq 0$, akkor az i-edik egyenletből $(i = 3, 4, \dots, n)$ kivonjuk a 2. egyenlet $\left(\frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}\right)$-szeresét: hogy $a_{i2}^{(1)}$ kinullázódjon.

$$A^{(2)} = \left[\begin{array}{ccccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \cdots & a_{1n}^{(0)} & a_{1n+1}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} & a_{2n+1}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} & a_{3n+1}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(2)} & a_{nn+1}^{(2)} \end{array}\right],$$

ahol

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \cdot a_{2j}^{(1)} \qquad (i = 3, \dots, n;\ j = 3, \dots, n, n+1).$$

Az $1., 2., \dots, k.$ egyenleteket változatlanul hagyjuk.

Ha $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, akkor az i-edik egyenletből $(i = k+1, \dots, n)$ kivonjuk a k-adik egyenlet $\left(\frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}\right)$-szeresét: hogy $a_{ik}^{(k-1)}$ kinullázódjon. Ezt a lépést láttuk, amikor a 2. lépésben az 1. lépés eredményét felhasználtuk. Ha 2 helyére k-t írunk, akkor megkapjuk az általános képleteket.

Így $n-1$ lépés után felső háromszögmátrix alakú LER-t kapunk:

$$A^{(n-1)} = \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & \cdots & a_{1n-1}^{(0)} & a_{1n}^{(0)} & & a_{1n+1}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n-1}^{(1)} & a_{2n}^{(1)} & & a_{2n+1}^{(1)} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & a_{n-1n-1}^{(n-2)} & a_{n-1n}^{(n-2)} & & a_{n-1n+1}^{(n-2)} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nn}^{(n-1)} & & a_{nn+1}^{(n-1)} \end{array}\right].$$

Ezután visszafelé haladva: az aktuális egyenletet osztjuk a főátlóbeli elemmel, majd a főátló fölött kinullázzuk az elemeket, az eddigiekel analóg „sorműveletek” alkalmazásával.
Végül $[I|x]$ alakot nyerünk. ($I \in \mathbb{R}^{n\times n}$ egységmátrix.)

Az algoritmus második része („jobbról-balra”), a felső háromszög alakú LER megoldása képlettel is kifejezhető. Figyeljük meg, hogy a felső-háromszögmátrixú alaknál soronként azonos felső indexek vannak.

A Gauss-elimináció általános lépése:

Ha $a_{k,k}^{(k-1)} \neq 0$, akkor a k. lépés képletei

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \cdot a_{kj}^{(k-1)} \qquad \begin{array}{l} k = 1, \dots, n-1; \\ i = k+1, \dots, n; \\ j = k+1, \dots, n, n+1. \end{array}$$

Visszahelyettesítés:

$$x_n = \frac{a_{nn+1}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}},$$

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

Alkalmazásai:

- LER megoldása (láttuk példán is)
- Determináns meghatározása: mivel a GE lépései determináns tartók, ezért

  $$\det(A) = \det(\Delta\text{alak}) = \prod_{k=1}^{n} a_{kk}^{(k-1)}$$

  Vigyázzunk : ha sort vagy oszlopot cserélünk, a determináns értéke változik.
- Több jobb oldallal (b) megoldás: lehet egyszerre, így a mátrixon csak egyszer eliminálunk.

  $$[A|b_1|b_2|b_3] \to \text{GE} \to \text{visszahely} \to [I|x_1|x_2|x_3]$$

- Mátrix inverzének meghatározása az $A \cdot X = I$ mátrixegyenlet megoldását jelenti.

  $$A \cdot [x_1|\ldots|x_n] = [e_1|\ldots|e_n] \quad \Leftrightarrow \quad \begin{array}{ll} Ax_1 & = e_1 \\ \ldots & \\ Ax_n & = e_n \end{array}$$

  Visszavezettük az előző pontra. A GE-t kiterjesztett mátrixon hajtjuk végre

  $$[A\,|\,I] \to \text{GE} \to \text{visszahely} \to [I\,|\,A^{-1}],$$

  visszahelyettesítés után jobb oldalon kapjuk az inverz mátrixot. Sor csere esetén az inverz nem változik, oszlopcsere esetén változik (lásd gyak.).

Megoldható-e egyáltalán a LER? Vizsgáljuk? Majd GE közben kiderül.

Megoldható, de mégsem tudjuk a GE-t végigcsinálni? Előfordulhat. Ilyenkor sort cserélünk nem változik a megoldás. Ha oszlopot cserélünk, akkor a megoldás komponensei a cserének megfelelően változnak.

Biztos és stabil megoldás a főelemkiválasztás.

B) Határozza meg az elimináció és a visszahelyettesítés műveletigényét.

A Gauss-elimináció műveletigénye:

$\frac{2}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2)$

Biz.: Rögzített k-ra: a k. lépés képletéből számolva

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \cdot a_{kj}^{(k-1)} \qquad \begin{array}{l} k = 1, \dots, n-1; \\ i = k+1, \dots, n; \\ j = k+1, \dots, n, n+1. \end{array}$$

$(n-k)$ osztás, $(n-k)(n-k+1)$ szorzás és $(n-k)(n-k+1)$ összeadás kell.
Összesen $(n-k)(2(n-k)+3)$ művelet. $(n-k =: s)$

$$\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)(2(n-k)+3) = \sum_{s=1}^{n-1} s(2s+3) = 2\sum_{s=1}^{n-1} s^2 + 3\sum_{k=1}^{n-1} s =$$

$$= 2\frac{(n-1)n(2n-1)}{6} + 3\frac{(n-1)n}{2} = \frac{2}{3}n^3 + \mathcal{O}(n^2). \quad \square$$

A visszahelyettesítés műveletigénye:

$n^2 + \mathcal{O}(n)$

Biz.:

$$x_n = \frac{a_{nn+1}^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}, \; x_i = \frac{1}{a_{ii}^{(i-1)}}\left(a_{in+1}^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i-1)} \cdot x_j\right) \quad (i = n-1, \dots, 1)$$

Rögzített i. sorra 1 db osztás, $(n-i)$ szorzás és $(n-i)$ összeadás.
Összesen: $2(n-i)+1$ művelet $(n-i =: s)$.

$$\sum_{s=1}^{n} 2s + 1 = 2 \cdot \frac{n(n+1)}{2} + n = n^2 + \mathcal{O}(n). \quad \square$$

Az $f(n)$ függvényt $\mathcal{O}(n^2)$-es nagyságrendűnek nevezzük, ha $\frac{f(n)}{n^2}$ korlátos minden $n \in \mathbb{N}$-re.