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

A) Mutassa be a Gauss-elimináció algoritmusát. Adjon szükséges és elégséges feltételeket a GE elakadására illetve végrehajthatóságára. Ismertesse LER megoldását LU-felbontás segítségével. Miért előnyös ennek használata a GE-vel szemben?

Gauss-elimináció algoritmusa mátrixszorzással

Írjuk fel a GE k-adik lépését ugyanilyen módszerrel! ($A \in \mathbb{R}^{n \times n}$)

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & & 1 \end{pmatrix} = I - \ell_k e_k^\top, \quad \ell_k = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ l_{k+1k} \\ \vdots \\ l_{nk} \end{pmatrix}.$$

(A zérus elemek nincsenek feltüntetve L_k-ban.)

Tehát ha $l_{ik} = \dfrac{a_{ik}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}} \quad (k = 1, \dots, n-1; \quad i = k+1, \dots, n)$,

akkor $L_k \cdot A^{(k-1)} = A^{(k)}$, vagyis megkaptuk a GE k-adik lépését.

LER megoldása LU-felbontás segítségével

Az L és U mátrixok elemei a következő képletekkel számolhatók:

$$i \le j \text{ (felső)} \qquad u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} \cdot u_{kj},$$

$$i > j \text{ (alsó)} \qquad l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} \cdot u_{kj} \right).$$

Ha jó sorrendben számolunk, mindig ismert az egész jobb oldal.

Szükséges és elégséges feltétel GE elakadására illetve végrehajthatóságára

Megj.:

- $u_{kk} = a_{kk}^{(k-1)}$ és $D_k = a_{11} \cdot a_{22}^{(1)} \cdots a_{kk}^{(k-1)}$
- Ha van A-nak LU-felbontása, ahol U átlójában nem nullák állnak, akkor $u_{kk} = a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$.
- $a_{nn}^{(n-1)} \neq 0 \Leftrightarrow \det(A) = D_n \neq 0$.
- Ha a GE végrehajtható, de $a_{nn}^{(n-1)} = 0$, akkor létezik LU-felbontás, de $\det(A) = \det(L) \cdot \det(U) = \det(U) = 0$-ból $u_{nn} = 0$. Ebben az esetben a LER vagy nem oldható meg vagy nem egyértelműen.

B) Ismertesse a részleges és teljes főelemkiválasztás módszereit. Mit mondhatunk az elakadásról részleges főelemkiválasztás alkalmazása esetén? Miért lehet érdemes teljes főelemkiválasztást használni?

Mivel kis számmal való osztásnál nagy lehet a kerekítési hiba hatása, ezért kedvezőtlen, ha az aii 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.

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

A k-adik lépésben válasszunk egy olyan m indexet, melyre $\left|a_{mk}^{(k-1)}\right|$ maximális ($m \in \{ k, k+1, \dots, n \}$), majd cseréljük ki a k-adik és m-edik sort.

Még jobban csökkenthető a számítási hiba a teljes főelem-kiválasztással. Ilyenkor a táblázatnak a főátlóbeli elemből jobbra és lefelé kiinduló legnagyobb négyzetes blokkjá- ban keressük a legnagyobb abszolút értékű elemet (főelem). Ennek főátlóba hozásához esetleg sor- és oszlopcserét is végre kell hajtanunk.

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

Pontos számolásnál a főelem-kiválasztásnak természetesen nincs jelentősége.

A k-adik lépésben válasszunk egy olyan (m_1, m_2) indexpárt, melyre $\left|a_{m_1 m_2}^{(k-1)}\right|$ maximális ($m_1, m_2 \in \{ k, k+1, \dots, n \}$), majd cseréljük ki a k-adik és m_1-edik sort, valamint a k-adik és m_2-edik oszlopot.

Ez azt jelenti, hogy a GE annyiban bonyolódik, hogy minden lépésben végrehajtunk egy keresést és egy sorcserét, ekkor azonban már biztos végrehajtható. Numerikus szempontból jobb, ha alkalmazunk főelemkiválasztást. Ezzel a GE-s hányadosaink pontosabbak lesznek. Biztos és stabil megoldás a főelemkiválasztás.

Elakadás

A GE elvégezhető sor és oszlopcsere nélkül
$\Leftrightarrow \quad a_{kk}^{(k-1)} \neq 0 \ \ (k = 1, 2, \dots, n-1)$.

$D_k \neq 0 \ \ (k = 1, 2, \dots, n-1) \quad \Leftrightarrow \quad a_{kk}^{k-1} \neq 0 \ \ (k = 1, 2, \dots, n-1)$.

Biz.: A GE átalakításai determináns tartók, ezért

$$D_k = a_{11} \cdot a_{22}^{(1)} \cdot \ldots \cdot a_{kk}^{(k-1)} = D_{k-1} \cdot a_{kk}^{(k-1)},$$

amiből az állítás adódik. A $D_n \neq 0$ illetve az $a_{nn}^{(n-1)} \neq 0$ feltétel nem szükséges a GE-hoz, csak a LER megoldhatóságához. □