

# Rozwiązywanie algebraicznych układów równań liniowych metodami bezpośrednimi

## Plan wykładu:

1. Definicje macierzy, norm etc.
2. Metoda eliminacji Gaussa, Jordana
3. Rozkład LU metodą Gaussa, Doolittle'a,
4. Układy równań z macierzą symetryczną. Rozkład  $LDL^T$ ,  $LL^T$
5. Układy równań z macierzą trójdziagonalną
6. Iteracyjne poprawianie rozwiązań
7. Układy liniowe nadokreślone, równania normalne, metody ortogonalizacji

## Pojęcia podstawowe

**Macierz** jest uporządkowanym układem  $m \times n$  liczb rzeczywistych lub zespolonych

$A = (a_{ij})$  ( $i=1, \dots, m$ ;  $j=1, \dots, n$ )

$$A_{m \times n} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Jeśli  $m=n$  to  $A$  jest **kwadratowa** stopnia  $n$ .

**Macierz diagonalna**  $D = (\delta_{ij} d_{ij})$

$$D = \begin{bmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & d_n \end{bmatrix}$$

**Macierz jednostkowa**  $I = (\delta_{ij})$

**Transpozycja** -  $A = (a_{ij})$  to  $A^T = (a_{ji})$

$$(A^T)^T = A$$

$$(\alpha A)^T = \alpha A^T$$

$$(A + B)^T = A^T + B^T$$

$$(AB)^T = B^T A^T$$

$$(Ax)^T = x^T A^T$$

**Ślad macierzy**  $A = A_{n \times n}$

$$\text{tr}(A) = \sum_{i=1}^n a_{ii}$$

$$\text{tr}(A^T) = \text{tr}(A)$$

### Macierz trójkątna lewa (dolna)

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix}$$

### Macierz trójkątna prawa (górna)

$$R = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \dots & r_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & r_{nn} \end{bmatrix}$$

Sumy, iloczyny i odwrotności macierzy trójkątnych tego samego rodzaju są macierzami trójkątnymi.

### Wyznacznik macierzy trójkątnej

$$\det(L) = l_{11}l_{22} \dots l_{nn}$$

$$\det(R) = r_{11}r_{22} \dots r_{nn}$$

$$\det(A) = \det(A^T)$$

$$\det(AB) = \det(A)\det(B)$$

Jeśli

$$\det(A) \neq 0$$

to macierz jest **nieosobliwa** i dla takiej macierzy istnieje **macierz odwrotna**  $A^{-1}$

$$AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$

### Macierz symetryczna

$$A^T = A$$

### Macierz ortogonalna $Q=Q_{m \times n}$

$$Q^T Q = I$$

$$Q^{-1} Q = I$$

$$Q^T = Q^{-1}$$

### Macierz idempotentna

$$A^2 = A$$

**Macierzą hermitowską** nazywamy macierz, która po transpozycji i sprzężeniu zespolonemu jej elementów jest równa macierzy pierwotnej

$$A^H = (A^T)^*$$

Elementy diagonalne macierzy hermitowskiej są rzeczywiste (pozostałe mogą być zespolone lub rzeczywiste).

**Macierzą dodatniookreśloną** nazywamy macierz rzeczywistą lub hermitowską o własności:

$$x^T A x > 0, \quad x \in R^n, \quad x \neq 0$$

Macierz dodatnio określona jest zawsze odwracalna. Macierz odwrotna jest również dodatnio określona.

**Przestrzenią liniową (wektorową)** nad ciałem liczb rzeczywistych (zespolonych) nazywamy zbiór obiektów (wektorów) z określonym działaniem dodawania elementów przestrzeni oraz mnożenia ich przez liczbę i oznaczamy  $R^N$  ( $C^N$ ).

**Aksjomaty:** łączność, przemienność, element neutralny, element odwrotny,....

Uporządkowany zbiór liczb rzeczywistych (zespolonych) tworzy wektor

$$x = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$$

Przestrzeń wektorowa będąca zbiorem takich obiektów ma wymiar  $n$ .

Dowolny zbiór  $n$  wektorów liniowo niezależnych w  $R^N$

$$y_1, y_2, \dots, y_n$$

tworzy bazę przestrzeni. Każdy element przestrzeni można zapisać jako kombinację liniową elementów bazy

$$x = \alpha_1 y_1 + \alpha_2 y_2 + \dots + \alpha_n y_n$$

Podprzestrzeń liniową  $R$  w  $R^N$  tworzy zbiór wszystkich wektorów

$$y_1, y_2, \dots, y_k, \quad k \leq n$$

Macierz możemy traktować jako obiekt zbudowany z wektorów ( wektory wierszowe lub kolumnowe).

**Rzędem macierzy**  $A = A_{m \times n}$

$$r = \text{rank}(A)$$

nazywamy największą liczbę niezależnych liniowo wektorów wierszowych lub kolumnowych. Jeśli  $r = m = n$  to macierz jest nieosobliwa.

## Normy wektorów i macierzy

Normy wprowadza się w celu ilościowego określania własności wektorów i macierzy.

**Normą wektora** nazywamy funkcję, która każdemu elementowi w  $R^n$  przyporządkowuje liczbę rzeczywistą. Dla dowolnych

$$x, y \in R^n \quad \alpha \in R$$

norma wektora musi spełniać następujące aksjomaty:

$$\|x\| \geq 0, \quad \|x\| = 0 \iff x = 0$$

$$\|\alpha x\| = |\alpha| \cdot \|x\|$$

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$$

### Dla n-wymiarowego wektora

$$x = [x_1, x_2, \dots, x_n]^T$$

najczęściej stosowane są normy z rodziny  $L_p$ :

$$\|x\|_p = (|x_1|^p + |x_2|^p + \dots + |x_n|^p)^{\frac{1}{p}}$$

- norma pierwsza

$$p = 1, \quad \|x\|_1 = |x_1| + |x_2| + \dots + |x_n|$$

- norma druga (euklidesowa)

$$p = 2, \quad \|x\|_2 = (x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2)^{1/2}$$

- norma maksymalna

$$p = \infty, \quad \|x\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \dots, |x_n|\}$$

Dla dowolnego wektora  $x$  w przestrzeni  $R^n$  prawdziwe są poniższe relacje pomiędzy normami:

$$\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1 \leq \sqrt{n}\|x\|_2 \leq n\|x\|_\infty$$

## Normy macierzy

Własności norm macierzy

$$\|A\| \geq 0, \quad \|A\| = 0 \iff A = 0$$

$$\|\alpha A\| = |\alpha| \cdot \|A\|$$

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\|$$

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$$

$$\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\| \text{ (normy zgodne)}$$

**Normy zgodne** - norma macierzy indukowana przez normę wektora

Macierz o m wierszach i n kolumnach można traktować jako operator liniowy przekształcający przestrzeń  $R^m$  w  $R^n$ . Normę takiej macierzy można określić przy użyciu wektorów:

$$\|A\|_{pq} = \sup_{\substack{x \in R^n \\ x \neq 0}} \frac{\|Ax\|_q}{\|x\|_p}$$

gdzie: p i q oznaczają normy wektorów w przestrzeniach  $R^n$  i w  $R^m$ . Mówimy, że norma  $\|A\|_{pq}$  jest normą indukowaną przez normy  $\|\cdot\|_p$  oraz  $\|\cdot\|_q$ . Dla  $p=q$  oznaczając

$$\|A\|_p = \|A\|_{pp}$$

możemy określić następujące normy macierzy

- maksymalna suma modułów w kolumnie

$$\|A\|_1 = \max_{j=1,2,\dots,n} \sum_{i=1}^m |a_{ij}|$$

- norma spektralna

$$\|A\|_2 = \left( \max_{i=1,\dots,n} \lambda_i(AA^T) \right)^{1/2}$$

- maksymalna suma modułów w wierszu

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,2,\dots,n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$$

- maksymalny moduł elementu

$$\|A\|_{1\infty} = \max_{i,j} |a_{ij}|$$

W przestrzeniach z normą  $\|\cdot\|_2$  często używa się **euklidesowej (Frobeniusa)** normy macierzy:

$$\|A\|_E = \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2}$$

która nie jest indukowana żadną normą ale spełnia ona z normą  $\|\cdot\|_2$  warunek zgodności:

$$\|A\|_2 \leq \|A\|_E \|x\|_2, \quad x \in R^n$$

Normy macierzy mają istotne znaczenie w analizie błędów (np. błędów rozwiązania układów równań liniowych).

Szukamy rozwiązania układu równań liniowych w postaci:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ \dots\dots\dots &= \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

Powyższy układ równań można zapisać w postaci macierzowej:

$$Ax = b$$

gdzie:

- macierz współczynników układu

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

- szukany wektor rozwiązań

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}$$

- wektor wyrazów wolnych

$$b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

Warunek rozwiązywalności układu niejednorodnego:

$$b \in R(A)$$

$R(A)$  - podprzestrzeń liniowa rozpięta na wektorach kolumnowych macierzy  $A$

Dla  $R(A) = R_n$

warunek rozwiązywalności układu jest spełniony dla każdego  $b$  i rozwiązanie ma postać

$$x = A^{-1}b$$

Jeśli  $\text{rank}(A)=r < n$  to rozwiązania tworzą rozmaitość  $(n-r)$  wymiarową.



## Układ równań z macierzą trójkątną

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2$$

.....

$$a_{nn}x_n = b_n$$

Zakładamy, że elementy leżące na diagonalu są niezerowe.  
Rozwiązanie układu można znaleźć posługując się wzorem rekurencyjnym, zaczynając od elementu  $x_n$ :

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$
$$x_i = \frac{b_i - a_{ii+1}x_{i+1} - \dots - a_{in}x_n}{a_{ii}}$$

W celu wyznaczenia wszystkich składowych wektora rozwiązania  $x$  należy wykonać:

- M operacji mnożenia i dzielenia

$$M = \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n$$

- D operacji dodawania i odejmowania

$$D = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$$

## Uwarunkowanie zadania - rozwiązania układu równań

Wpływ błędów zaokrągleń na wynik można oszacować analizując zaburzenia danych:  $A, b$

a) zaburzymy wektor  $b$ :

$$\begin{aligned} A(x + \delta x) &= b + \delta b \\ \delta x &= A^{-1} \delta b \\ \|\delta x\| &\leq \|A^{-1}\| \cdot \|\delta b\| \end{aligned}$$

b) zaburzymy elementy macierzy  $A$ :

$$\begin{aligned} (A + \delta A)(x + \delta x) &= b \\ A\delta x + \delta A(x + \delta x) &= 0 \\ \delta x &= -A^{-1} \delta A(x + \delta x) \\ \|\delta x\| &\leq \|A^{-1}\| \cdot \|\delta A\| \cdot \|x + \delta x\| \end{aligned}$$

ostatnią nierówność zapisujemy w postaci

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x + \delta x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}$$

gdzie

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

jest **wskaźnikiem uwarunkowania macierzy**

Korzystając z wyniku (a) oraz nierówności

$$\|b\| = \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$$

dostajemy oszacowanie na błąd względny rozwiązania:

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \kappa(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

Wniosek - duży wskaźnik uwarunkowania macierzy może powodować duże względne zaburzenia rozwiązania nawet dla małych zaburzeń wektora danych. Zadanie jest wówczas **źle uwarunkowane**.

**Błędy zaokrąglenia** pojawiające się podczas obliczeń możemy oszacować zastępując je zaburzeniem  $\delta A^z$ . Szacujemy poziom zaburzeń elementów A:

$$|\delta a_{ij}^{(z)}| \leq \varepsilon \begin{bmatrix} n|a_{11}| & (n+2)|a_{12}| & \dots & 4|a_{1,n-1}| & 3|a_{1,n}| \\ & (n-1)|a_{22}| & \dots & 4|a_{2,n-1}| & 3|a_{2,n}| \\ & & \ddots & & \\ & 0 & & 2|a_{n-1,n-1}| & 3|a_{n-1,n}| \\ & & & & 1|a_{nn}| \end{bmatrix}$$

skąd wynika

$$\|\delta A^{(z)}\|_p \leq \varepsilon(n+2)\|A\|_p, \quad p = 1, \infty, E$$

Znamy oszacowanie od góry elementów macierzy A:  $\|A\|_{1\infty} \leq g$   
więc możemy oszacować prawe strony nierówności.

a) przypadek ogólny

$$\|\delta A^{(z)}\|_1 \leq \varepsilon \left( \frac{1}{4}n^2 + \frac{5}{2}n \right) g \quad \|\delta A^{(z)}\|_\infty \leq \varepsilon \left( \frac{1}{2}n^2 + \frac{5}{2}n - 2 \right) g$$

b) macierz diagonalnie dominująca wierszowo

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^n |a_{ik}|, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad \|\delta A^{(z)}\|_\infty \leq \varepsilon (2n+2) g$$

c) macierz diagonalnie dominująca kolumnowo

$$\|\delta A^{(z)}\|_1 \leq \varepsilon (2n+1) g$$

**Metoda eliminacji Gaussa** rozwiązywania układu równań liniowych. Metoda jest dwuetapowa:

1) **Eliminacja zmiennych.** Układ pierwotny:

$$A^{(1)}x = b^{(1)}$$

$$\begin{array}{rcl} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \dots + a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\ \dots\dots\dots & = & \dots \\ a_{n1}^{(1)}x_1 + a_{n2}^{(1)}x_2 + \dots + a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)} \end{array}$$

Odejmujemy od i-tego wiersza (i=2,3,...,n) wiersz pierwszy pomnożony przez współczynnik

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$$

Z równań i=2,3,...,n wyeliminowana została zmienna  $x_1$ .

$$A^{(2)}x = b^{(2)}$$

$$\begin{array}{rcl} a_{11}^{(2)}x_1 + a_{12}^{(2)}x_2 + \dots + a_{1n}^{(2)}x_n & = & b_1^{(2)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ \dots\dots\dots & = & \dots \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + \dots + a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)} \end{array}$$

Powtarzamy operację, ale odejmujemy od i-tego wiersza (i=3,4,...,n) wiersz drugi pomnożony przez współczynnik

$$l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$$

Postępując dalej w ten sposób eliminujemy z każdego następnego równania jedną zmienną. Eliminację kończymy po (n-1) krokach, gdy uzyskamy trójkątny układ równań w postaci:

$$\begin{array}{rcl} a_{11}^{(n)}x_1 + a_{12}^{(n)}x_2 + \dots + a_{1n}^{(n)}x_n & = & b_1^{(n)} \\ a_{22}^{(n)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(n)}x_n & = & b_2^{(n)} \\ \dots\dots\dots & = & \dots \\ a_{nn}^{(n)}x_n & = & b_n^{(n)} \end{array}$$

$$A^{(n)}x = b^{(n)}$$

## 2) Etap drugi nazywany jest postępowaniem odwrotnym.

Rozwiązanie (kolejne składowe wektora  $x$ ) znajdujemy stosując wzór rekurencyjny dla macierzy trójkątnej. Wyznaczenie rozwiązania metodą Gaussa wymaga wykonania:

-  $M$  op. mnożenia i dzielenia

$$M = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$$

-  $D$  op. dodawania i odejmowania

$$D = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$$

Metoda eliminacji w tej postaci jest niestabilna numerycznie – problem dzielenia przez 0 lub liczbę bliską zero. Rozwiązanie:

a) częściowy wybór elementów głównych

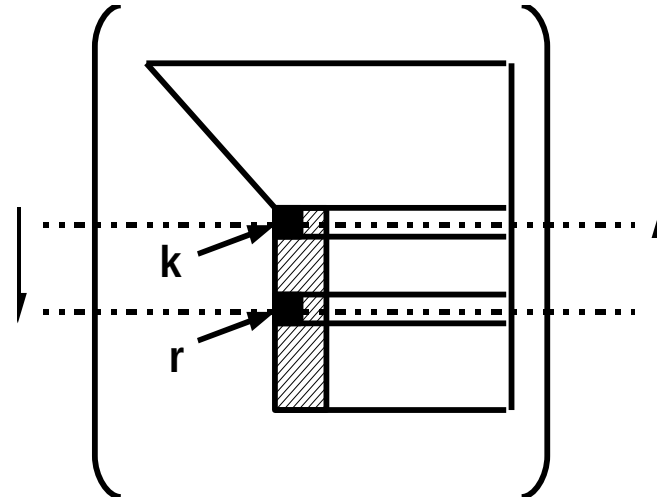
b) pełny wybór elementów głównych

### Częściowy wybór elementów głównych

W  $k$ -tym kroku szukamy elementu

$$|a_{rk}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^k|$$

i przestawiamy wiersze  $r$  oraz  $k$ .

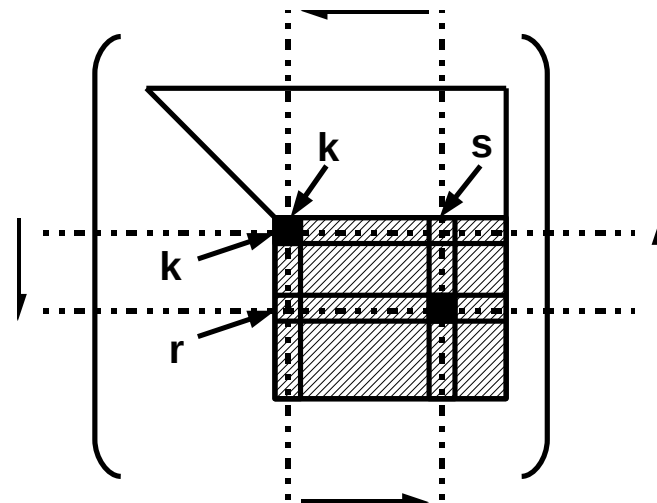


### Pełny wybór elementów głównych

W  $k$ -tym kroku szukamy elementu

$$|a_{rs}^{(k)}| = \max_{k \leq i, j \leq n} |a_{ij}^k|$$

i przestawiamy wiersze:  $k$  i  $r$  oraz kolumny:  $k$  i  $s$



Stosując wybór elementu głównego rozwiązanie otrzymujemy zawsze.  
W trakcie wyboru elementu głównego należy zmienić także kolejność w x i b.

Modyfikacji tej można nie stosować dla:

a) macierzy z dominującą przekątną

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

b) macierzy symetrycznej i jednocześnie dodatniookreślonej

### **Metoda eliminacji Jordana** **(eliminacji zupełnej)**

W układzie równań:

$$A^{(1)} x = b^{(1)}$$

$$a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + \dots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)}$$

$$a_{21}^{(1)} x_1 + a_{22}^{(1)} x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)} x_n = b_2^{(1)}$$

$$\dots \dots \dots = \dots$$

$$a_{n1}^{(1)} x_1 + a_{n2}^{(1)} x_2 + \dots + a_{nn}^{(1)} x_n = b_n^{(1)}$$

równanie pierwsze dzielimy obustronnie przez współczynnik:  $w_1 = a_{11}^{(1)}$

Następnie odejmujemy od i-tego wiersza ( $i=2,3,\dots,n$ ) wiersz pierwszy przemnożony przez

$$w_{1i} = a_{i1}^{(1)}$$

i otrzymujemy

$$A^{(2)} x = b^{(2)}$$

$$x_1 + a_{12}^{(2)} x_2 + \dots + a_{1n}^{(2)} x_n = b_1^{(2)}$$

$$a_{22}^{(2)} x_2 + \dots + a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)}$$

$$\dots \dots \dots = \dots$$

$$a_{n2}^{(2)} x_2 + \dots + a_{nn}^{(2)} x_n = b_n^{(2)}$$

Podobnie postępujemy z równaniem drugim. Dzielimy je przez

$$w_2 = a_{22}^{(2)}$$

Następnie od i-tego wiersza ( $i=1,3,4,\dots,n$ ) odejmujemy wiersz drugi pomnożony przez współczynnik:

$$w_{2i} = a_{i2}^{(2)}$$

Otrzymujemy zmodyfikowany układ równań:

$$A^{(3)}x = b^{(3)}$$

$$\begin{aligned} x_1 + 0 \cdot x_2 + a_{13}^{(3)} x_3 + \dots + a_{1n}^{(3)} x_n &= b_1^{(3)} \\ x_2 + a_{23}^{(3)} x_3 + \dots + a_{2n}^{(3)} x_n &= b_2^{(3)} \\ \dots &= \dots \\ a_{n3}^{(3)} x_3 + \dots + a_{nn}^{(3)} x_n &= b_n^{(3)} \end{aligned}$$

Po przeprowadzeniu (n-1) eliminacji zmiennych układ równań ma poniższą postać:

$$\begin{aligned} x_1 &= b_1^{(n)} \\ x_2 &= b_2^{(n)} \\ \dots &= \dots \\ x_n &= b_n^{(n)} \end{aligned}$$

czyli gotowe rozwiązanie. Liczba operacji:

$$M = \frac{1}{2}n^3 + \frac{1}{2}n^2$$

$$D = \frac{1}{2}n^3 - \frac{1}{2}n^2$$

## Rozkład LU metodą Gaussa-Crouta(GCW)

Metodę Gaussa można użyć do znalezienia takich macierzy L i U, które z macierzą A związane są relacją:

$$A = L \cdot U$$

Procedura wyznaczania elementów tych macierzy nosi nazwę **rozkładu LU**.

Sposób postępowania (wykorzystujemy **metodę eliminacji Gaussa**):

1) mnożenie wiersza pierwszego przez czynnik

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$$

i odjęcie go od i-tego wiersza (i=2...n), zastępujemy mnożeniem przez macierz:

$$L^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}_{n \times n}$$

co można zapisać macierzowo:

$$L^{(1)} A^{(1)} = A^{(2)}$$

$$L^{(1)} b^{(1)} = b^{(2)}$$

Eliminacja zmiennej z równań ( $i=3,4,\dots,n$ ) wygląda podobnie. Mnożymy wiersze zmodyfikowanego układu równań o indeksach  $i=3,4,\dots,n$  przez czynnik

$$l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}$$

i odejmujemy od nich wiersz drugi. Operację tą można przeprowadzić mnożąc układ równań obustronnie przez macierz  $L^{(2)}$ :

$$L^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -l_{32} & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ 0 & -l_{n2} & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

Zapis macierzowy operacji:

$$\begin{aligned} L^{(2)} A^{(2)} &= A^{(3)} \\ L^{(2)} b^{(2)} &= b^{(3)} \end{aligned}$$

Po wykonaniu  $(n-1)$  takich operacji dostajemy

$$\begin{aligned} L^{(n-1)} L^{(n-2)} \dots L^{(1)} A^{(1)} &= A^{(n)} \\ L^{(n-1)} L^{(n-2)} \dots L^{(1)} b^{(1)} &= b^{(n)} \end{aligned}$$

Macierze  $L^{(i)}$  są nieosobliwe (można znaleźć dla każdej macierz odwrotną). Przemnażając obie strony powyższych równań przez  $(L^{(n-1)})^{-1}, (L^{(n-2)})^{-1}, \dots$ , otrzymamy:

$$\begin{aligned} A^{(1)} &= (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \dots (L^{(n-1)})^{-1} A^{(n)} \\ b^{(1)} &= (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \dots (L^{(n-1)})^{-1} b^{(n)} \end{aligned}$$

wprowadzamy oznaczenia

$$\begin{aligned} L &= (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \dots (L^{(n-1)})^{-1} \\ U &= A^{(n)} = \left( L^{(n-1)} L^{(n-2)} \dots L^{(1)} \right) A^{(1)} \\ A &= L \cdot U \end{aligned}$$

Jak znaleźć macierze  $(L^{(i)})^{-1}$ ?

$$L^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 1 & 0 \\ -l_{n1} & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

$$(L^{(1)})^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & 1 & 0 \\ l_{n1} & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}$$



Sprawdzenie

$$L^{(i)} \left( L^{(i)} \right)^{-1} = I$$

**macierz  $L$**  jest macierzą dolną z jedynkami na diagonalu:

$$L = (L^{(1)})^{-1} (L^{(2)})^{-1} \dots (L^{(n-1)})^{-1}$$
$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{bmatrix}$$

**macierz  $U$**  jest macierzą górną z niezerowymi elementami na diagonalu:

$$U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{nn} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Dysponując macierzami  $L$  i  $U$  można rozwiązać układ równań:

$$Ax = b$$

$$LUx = b$$

poprzez rozwiązanie 2 układów równań

$$Ly = b$$

$$Ux = y$$

Rozwiązanie każdego z równań wiąże się z nakładem obliczeń jak dla układu z macierzą trójkątną ( $\sim 1n^2$ ). Rozkład LU (eliminacja Gaussa) to nakład rzędu  $\sim 0.5n^3$ .

### Rozkład LU metodą Doolittle'a

Równanie  $A=LU$  traktujemy jako  $n^2$  równań z  $n^2$  niewiadomymi  $l_{ij}$  ( $i>j$ ) i niewiadomymi  $u_{ij}$  ( $i \leq j$ )

(**poprzednia strona**). Elementy  $l_{ij}$  oraz  $u_{ij}$  oblicza się ze wzorów:

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad j = i, i+1, \dots, n$$

$$l_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}}{u_{ii}}, \quad j = i+1, i+2, \dots, n$$

Liczba wykonywanych działań jest identyczna jak w metodzie Gaussa. Elementy  $u_{ij}$  oraz  $l_{ij}$  można zapamiętać w komórkach macierzy  $A$ .

### Błąd rozwiązania układu równań przy użyciu rozkładu LU

Przeprowadzając rozkład LU macierzy  $A$ :

$$\tilde{L}\tilde{U} = A + E$$

Oszacowanie normy macierzy zaburzeń (LU)

$$\|E\|_{\infty} \leq \varepsilon k_1(n) \|A\|_{\infty}$$
$$k_1(n) = n^2 g$$

Szukamy rozwiązań układów

$$\tilde{L}y = (L + \delta L)y = b$$

$$\tilde{U}x = (U + \delta U)\tilde{x} = y$$

co można zapisać

$$(A + \delta A)\tilde{x} = b$$

Zaburzenie macierzy ( $\delta A$ ) zależy od  $A$  i od  $b$  (**tym różni się od E**):

$$\|\delta A\|_{\infty} \leq \varepsilon k_2(n) \|A\|_{\infty}$$
$$k_2(n) = (n^3 + 3n^2)g$$

Oszacowanie wsp.  $g$ :

- GCW

$$g \leq 2^{n-1}$$

-pełny wybór elementu podstawowego

$$g \leq 1.8n^{0.25 \ln(n)}$$

- realne oszacowanie (z testów numerycznych)

$$g \approx 8$$

Jaki jest **wektor reszt** rozwiązania?

$$r = b - A\tilde{x} = (A + \delta A)\tilde{x} - A\tilde{x} = \delta A\tilde{x}$$

$$\|r\|_{\infty} = \|b - A\tilde{x}\|_{\infty} \leq k_2 \varepsilon \|\delta A\|_{\infty} \|\tilde{x}\|_{\infty}$$

Norma maksymalna wektora reszt może być mała nawet dla źle uwarunkowanych macierzy.

Zalety:

- 1) Duża wydajność dla dużej liczby równań. Rozkład LU opłaca się stosować w przypadku rozwiązywania wielu układów równań z tą samą macierzą współczynników układu A. Każdy układ równań różni się wtedy tylko wektorem wyrazów wolnych. Rozkład LU wykonuje się w takim przypadku tylko raz (ilość operacji  $\sim n^3$ ). Rozwiązanie pojedynczego układu równań można znaleźć przy zastosowaniu algorytmu postępowania odwrotnego (ilość operacji  $\sim n^2$ ).
- 2) Oszczędność zajmowanej pamięci. Elementy macierzy L i U mogą zostać zapisane w macierzy A.
- 3) Jeśli macierz A jest symetryczna i dodatniookreślona to nie trzeba dokonywać wyboru elementów podstawowych.

## Układy równań z macierzą symetryczną. Rozkład LDL<sup>T</sup>

Oznaczmy rozkład LU jako:  $A = L\bar{U}$

Szukamy rozkładu macierzy A w postaci:

$$A = LDU$$

gdzie: L - macierz trójkątna dolna z jedynkami na diagonalu, D - macierz diagonalna z elementami diagonalnymi macierzy  $\bar{U}$ , U - macierz trójkątna górna z jedynkami na diagonalu

Wykorzystujemy symetrię macierzy

$$U^T D L^T = A^T = A \Rightarrow U = L^T$$

co prowadzi do rozkładu dla macierzy symetrycznych:

$$A = LDL^T$$

Rozwiązanie układu  $Ax=b$ :

$$Lz = b$$

$$Dy = z$$

$$L^T x = y$$

Elementy rozkładu wyznaczamy rekurencyjnie

$$d_1 = a_{11}$$

a dla  $i=2,3,\dots,n$  oblicza się na przemian:

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} c_{ik} l_{jk}}{d_j}$$

$$c_{ij} = d_j l_{ij}, \quad j = 1, 2, \dots, i-1$$

$$d_i = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} c_{ik} l_{ik}$$

Nakład obliczeń:

$$M = \frac{1}{6}n^3 + n^2 - \frac{7}{6}n$$

$$D = \frac{1}{6}n^3 - \frac{1}{6}n$$

Zalety:

- nakład obliczeń dwukrotnie mniejszy niż w GCW
- dzięki symetrii macierzy wystarczy zapamiętać

$$N = \frac{n(n+1)}{2}$$

elementów

## Rozkład $LL^T$

### (Banachiewicza-Cholesky'ego)

Jeśli macierz  $A$  jest macierzą symetryczną dodatnio określoną wówczas można dokonać następującego rozkładu:

$$A = LL^T$$

Macierz  $L$  jest macierzą trójkątną dolną z elementami na diagonalu mogącymi się różnić od 1. Macierz

$$\bar{L} = -L$$

spełnia warunek

$$A = \bar{L}\bar{L}^T$$

więc rozkład ten nie jest jednoznaczny. Jeśli jednak liczby na diagonalu macierzy  $L$  są dodatnie wówczas rozkład jest jednoznaczny, a elementy macierzy wyznaczamy ze wzorów:

$$l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$l_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk}l_{ik}}{l_{ii}}, \quad j = i+1, i+2, \dots, n$$

Nakład obliczeń:

$$n - \sqrt{\quad}$$

$$M = \frac{1}{6}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{2}{3}n$$

$$D = \frac{1}{6}n^3 + \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{3}n$$

### Przykład

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 5 & 3 \\ 2 & 3 & 6 \end{bmatrix}$$

$$i = 1 : \quad l_{11} = 2, \quad l_{21} = 1, \quad l_{31} = 1$$

$$i = 2 : \quad l_{22} = 2, \quad l_{32} = 1$$

$$i = 3 : \quad l_{33} = 2$$

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} 4 & 2 & 2 \\ 2 & 5 & 3 \\ 2 & 3 & 6 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

## Inne zastosowania rozkładu LU.

### Obliczanie wyznacznika

Aby obliczyć wyznacznik macierzy  $A$  możemy posłużyć się rozkładem

$$A = LU$$

$$\begin{aligned} \det(A + E) &= \det(LU) \\ &= \det(L)\det(U) = \det(U) \end{aligned}$$

$$\det(L) = 1$$

Wyznacznik macierzy  $U$  jest iloczynem elementów stojących na diagonalu tej macierzy ( $n-1$  operacji mnożenia).

### Odwracanie macierzy

Aby znaleźć przy pomocy macierzy  $L$  i  $U$  macierz odwrotną  $A^{-1}$  należy rozwiązać  $n$  układów równań:

$$LUx^{(i)} = e^{(i)}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$e^{(i)} = [0, 0, \dots, 1, \dots, 0]^T$$

$$LUX = I \rightarrow X = A^{-1}$$

Rozwiązania układów równań  $x^{(i)}$  stanowią kolumny macierzy odwrotnej  $A^{-1}$  (po uwzględnieniu ewentualnych przestawień wierszy wynikających z wyboru elementu podstawowego).

### Przykład

Znaleźć macierz  $A^{-1}$  jeśli macierz  $A$  jest zdefiniowana:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 1/6 \\ 1/6 \\ -1/6 \end{bmatrix} \quad x^{(2)} = \begin{bmatrix} -1/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \end{bmatrix}$$

$$x^{(3)} = \begin{bmatrix} 1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \end{bmatrix} \quad P_n = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{4} \end{bmatrix}$$

## Układy równań z macierzą trójdziagonalną

Szukamy rozwiązania układu równań:

$$Tx = b$$

Zdarza się że macierz układu równań ma postać (np. równania z ilorazami różnicowymi):

$$T = \begin{bmatrix} d_1 & c_1 & & & \\ a_2 & d_2 & c_2 & & \\ & a_3 & d_3 & c_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & a_n & d_n \end{bmatrix}$$

Można wykonać rozkład LU macierzy T, macierze te mają postać:

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ l_2 & 1 & & & & 0 \\ & l_3 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & & \\ 0 & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & l_n & 1 \end{bmatrix}$$

$$U = \begin{bmatrix} u_1 & c_1 & & & & \\ & u_2 & c_2 & & & 0 \\ & & u_3 & c_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & & \ddots & c_{n-1} \\ & & & & & u_n \end{bmatrix}$$

Elementy macierzy rozkładu obliczamy rekurencyjnie:

$$u_1 = d_1$$

$$l_i = \frac{a_i}{u_{i-1}}$$

$$u_i = d_i - l_i c_{i-1}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

Rozwiązanie układu  $Tx=b$ :

$$Ly = b$$

$$Ux = y$$

Rozwiązanie:

$$y_1 = b_1$$

$$y_i = b_i - l_i y_{i-1}$$

$$x_n = \frac{y_n}{u_n}$$

$$x_i = \frac{y_i - c_i x_{i+1}}{u_i}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1$$

nakład obliczeń:  $M=2n-2$ ,  $D=n-1$   
liczba zajętych komórek:  **$P=3n-2$**

Jeśli macierz jest **dominująca kolumnowo** to rozkład  $T=LU$  jest równoważny rozkładowi z częściowym wyborem elementu podstawowego (niezawodność metody).

### Iteracyjne poprawianie rozwiązania układu równań

Błąd rozwiązania można sprawdzić obliczając **wektor reszt**:

$$r = b - A\tilde{x}$$

Zazwyczaj współrzędne wektora  $r$  są różne od zera. Oznacza to, że nie uzyskaliśmy dokładnego rozwiązania, ale przybliżone. Rozwiązanie to chcemy poprawić:

$$\tilde{x} = x - \delta x$$

gdzie:  $\delta x$  jest poprawką, którą można łatwo wyznaczyć rozwiązując układ:

$$A\delta x = r$$

Należy jednak pamiętać, że wyznaczona poprawka do rozwiązania również jest przybliżeniem. Kolejne **poprawione rozwiązanie**, które uzyskamy będzie miało postać:

$$\bar{x} = \tilde{x} + \delta x + \delta(\delta x)$$

Jeżeli wektor reszt  **$r=b-Ax$**  jest obliczony dokładnie, poprawka  $\delta x$  została wyznaczona metodą Gaussa-Crouta oraz zachodzi warunek:

$$\frac{1}{2} \|r\|_{\infty} \geq \varepsilon \|A\|_{\infty} W_3(n) \|\delta x\|_{\infty} + \|Ax\|_{\infty} \varepsilon$$

$$W_3(n) = \frac{9}{2}n^3 + \frac{61}{2}n^2 - 18n - 16$$

wówczas norma wektora reszt obliczona w kolejnych iteracjach maleje

$$\|b - A\bar{x}\|_{\infty} \leq \frac{1}{2} \|b - Ax\|_{\infty}$$



Algorytm iteracyjnego poprawiania rozwiązania:

1. Rozwiązujemy układ  $Ax^{(1)}=b$  metodą Gaussa
2. Obliczamy wektor reszt  $r^{(1)}$  i sprawdzamy rozwiązanie
3. Sprawdzamy czy poniższy warunek jest prawdziwy

$$\|r^{(1)}\|_{\infty} > \|Ax^{(1)}\|_{\infty}\varepsilon$$

jeśli nie to przerywamy obliczenia. Jeśli jest spełniony to kontynuujemy.

4. Obliczamy poprawkę  $\delta x^{(1)}$  i wyznaczamy

$$x^{(2)} = x^{(1)} + \delta x^{(1)}$$

5. Wyznaczamy wektor reszt  $r^{(2)}$  i sprawdzamy rozwiązanie. W razie konieczności powtarzamy kroki 3,4,5 aż do skutku.

## Rozwiązywanie układów liniowych nadokreślonych

Jak rozwiązać poniższy problem?

$$\begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ b_m \end{bmatrix}$$

dla warunku  $m > n$

Brak dokładnego rozwiązania w większości przypadków. Można poszukiwać conajwyżej „najlepszego” przybliżenia rozwiązania w sensie średniokwadratowym.

Dla

$$r = b - Ax$$

rozwiązaniem średniokwadratowym problemu nadokreślonego (**least square problem**) jest taki wektor  $x$ , który minimalizuje normę:

$$\|r\|_2 = (r^T r)^{1/2}$$

Jeśli macierz  $A$  jest macierzą o rozmiarach  $m \times n$  i elementach rzeczywistych,  $b$  jest wektorem  $m$ -elementowym, a  $x$  wektorem  $n$ -elementowym spełniającym równanie

$$A^T(b - Ax) = 0$$

wówczas dla dowolnego  $n$ -elementowego wektora  $y$  spełniona jest nierówność

$$\|b - Ax\|_2 \leq \|b - Ay\|_2$$

Dla dowolnego wektora otrzymujemy warunek

$$(Az)^T(b - Ax) = 0$$

skąd wynika że wektor  $r$  jest ortogonalny do wszystkich wektorów z przestrzeni  $R(A)$  rozpiętej na wektorach kolumnowych macierzy  $A$ .

Ponadto nadokreślony układ równań można przekształcić do postaci **układu normalnego**

$$(A^T A)x = A^T b$$

Macierz  $A^T A$  jest symetryczna, dlatego układ normalny można rozwiązać metodą Cholesky'ego. Jeśli kolumny macierzy  $A$  są niezależne liniowo to macierz jest nieosobliwa.

$$x \neq 0 \rightarrow Ax \neq 0$$

$$\begin{aligned} x^T (A^T A)x &= (Ax)^T Ax = \|Ax\|_2^2 > 0 \\ &\rightarrow \det(A^T A) > 0 \end{aligned} \quad 26$$

Gdy kolumny A są niezależne liniowo, wówczas rozwiązanie układu jest jednoznaczne

$$x = A^I b$$

gdzie macierz  $A^I$ :

$$A^I = (A^T A)^{-1} A^T$$

jest **pseudoodwrotnością** macierzy A.

$$r = (I - P_A)b$$

$$P_A = AA^I = A(A^T A)^{-1} A^T$$

$P_A$  jest operatorem rzutu ortogonalnego na przestrzeń kolumnową macierzy A.

**Uwaga:** jeśli kolumny A są zależne liniowo (**bardzo często**) to wówczas istnieje wiele rozwiązań (średniokwadratowych) dających ten sam wektor reszt.

**Przykład** - wpływ uwarunkowania macierzy na rozwiązanie układu normalnego

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad |\varepsilon| \ll 1$$

Przekształcamy do układu normalnego

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 + \varepsilon^2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 + \varepsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 & 1 + \varepsilon^2 \end{bmatrix}$$

$$A^T b = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Dla precyzji obliczeń rzędu  $\varepsilon$

$$\varepsilon^2 \approx 0$$

i macierz  $A^T A$  staje się osobliwa - układ nie posiada rozwiązania.

### Metody wykorzystujące rozkład QR

Dla macierzy A o rozmiarach  $m \times n$ , w której kolumny są niezależne liniowo istnieje jednoznaczny rozkład w postaci

$$A = QR$$

Q jest macierzą o rozmiarach  $m \times n$  taką że:

$$Q^T Q = D$$

D jest macierzą diagonalną

$$D = \text{diag}(d_1, d_2, \dots, d_n)$$

$$d_k > 0, \quad k = 1, \dots, n$$

R jest macierzą trójkątną górną z elementami

$$r_{kk} = 1, \quad k = 1, \dots, n$$

Warunek minimalizacji normy wektora reszt w sensie średniokwadratowym przyjmuje postać

$$Ax = b \Rightarrow A^T Ax = A^T b$$

$$R^T Q^T Q R x = R^T Q^T b$$

$$R^T D R x = R^T Q^T b$$

$$D R x = Q^T b$$

$$R x = D^{-1} Q^T b = y$$

Jak wyznaczyć macierze Q i R?

### Zmodyfikowana metoda Grama-Schmidta

Wyznaczamy ciąg macierzy

$$A = A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(n+1)} = Q$$

$$A^{(k)} = (q_1, \dots, q_{k-1}, a_k^{(k)}, \dots, a_n^{(k)})$$

$$q_i = \begin{bmatrix} q_{1,i} \\ \dots \\ \dots \\ q_{m,i} \end{bmatrix} \quad a_i^{(k)} = \begin{bmatrix} a_{1,i}^{(k)} \\ \dots \\ \dots \\ a_{m,i}^{(k)} \end{bmatrix}$$

Założenia

- 1) k-1 pierwszych kolumn w  $A^{(k)}$  to także k-1 pierwszych kolumn w Q
- 2) kolumny

$$a_k^{(k)}, \dots, a_n^{(k)}$$

są ortogonalne do kolumn

$$q_1, \dots, q_{k-1}$$

Proces ortogonalizacji polega na rekurencyjnej ortogonalizacji kolumn o indeksie od k do n w k-tej iteracji względem kolumny  $q_k$

$$q_k = a_k^{(k)}, \quad d_k = q_k^T q_k, \quad r_{kk} = 1$$

$$a_j^{(k+1)} = a_j^{(k)} - r_{kj} q_k$$

$$r_{kj} = \frac{q_k^T a_j^{(k)}}{d_k}$$

$$j = k + 1, \dots, n$$

w ten sposób wyznaczamy k-tą kolumnę R (elementy  $r_{kj}$ ) oraz kolumnę k+1 macierzy Q (elementy  $a_j^{(k+1)}$ ).  
Klasyczna met. GS:

klasyczna met. GS  
różni się kolejnością  
obliczeń:

$$q_k = a_k - \sum_{i=1}^{k-1} r_{ik} q_i$$

$$r_{ik} = \frac{q_i^T a_k}{d_i}, \quad i = 1, 2, \dots, k-1$$

Jednocześnie przekształcamy wektor b tj.:

$$b = b^{(1)}, b^{(2)}, \dots, b^{(n+1)}$$

$$b^{(k+1)} = b^{(k)} - y_k q_k, \quad y_k = \frac{q_k^T b^{(k)}}{d_k}$$

Po n+1 krokach  $b^{(n+1)}$  jest to część wektora pierwotnego ortogonalna do  $R(A)$  i stanowi wektor reszt.

Po przeprowadzeniu procesu ortogonalizacji do końca (kolumny macierzy A są liniowo niezależne) dostajemy

$$Q = (q_1, \dots, q_n)$$

$$R = (r_{kj})$$

$$y = (y_1, y_2, \dots, y_n)^T$$

$$A = QR$$

$$b = Qy + r$$

$$Rx = y$$

Wyznaczenie R i y wymaga wykonania  $mn(n+1)$  operacji a rozwiązanie układu  $n(n+1)/2$ .

## Metoda Grama-Schmidta dla macierzy o liniowo zależnych kolumnach

$$A = QR \rightarrow AR^{-1} = Q \rightarrow Q = AS$$

$S=R^{-1}$  jest macierzą trójkątną górną.  
Stąd wynika

$$q_k = s_{1k}a_1 + s_{2k}a_2 + \dots + s_{kk}a_k$$

Może się okazać że  $a_1, a_2, \dots, a_{k-1}$  są niezależne liniowo, ale  $a_k$  jest już ich kombinacją (oraz wektorów  $q_1, q_2, \dots$ ). Wtedy

$$a_k^{(k)} = 0 \quad (\text{w macierzy } Q)$$

i powinniśmy przerwać proces ortogonalizacji. Jeśli jednak

$$\text{rank}(A) > k$$

to istnieje wektor

$$a_j^{(k)} \neq 0, \quad k \leq j \leq n$$

Można więc przestawić kolumny j i k oraz prowadzić proces ortogonalizacji do momentu gdy pozostałe wektory  $a_j^{(k)}$  nie będą liniowo zależne. Szukamy wektora o największej normie:

$$\|a_s^{(k)}\|_2 = \max_{k \leq j \leq n} \|a_j^{(k)}\|_2$$

a następnie za kolumnę k podstawiamy kolumnę s.

Dla  $\text{rank}(A)=r_A < n$  rozkład QR ma postać

$$Q = (q_1, q_2, \dots, q_{r_A})$$

$$A = Q(R, S)$$

$$b = Qy + r$$

gdzie:  $R_{r \times r}$  - macierz trójkątna górna ( $r_{kk}=1$ )

$S$  - macierz o rozmiarach  $r_A \times (n-r_A)$

Rozwiązania szukamy rozwiązując układ

$$(R, S)x = y$$

$$x = (x_1, x_2)^T$$

$$x_1 = R^{-1}y - R^{-1}Sx_2$$

gdzie:  $x_1$  - ma  $r$  składowych,  $x_2$  - jest dowolnym wektorem o  $n-r$  składowych (np.  $x_2=0$ ).

### **Przykład**

zakładamy

$$\varepsilon \ll 1, \quad \varepsilon^2 \approx 0$$

$$Q = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & \varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & 0 & -\varepsilon/2 \end{bmatrix}, \quad r = -\frac{1}{3}\varepsilon \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$R = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1/2 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} 1 \\ 1/2 \\ 1/3 \end{bmatrix}$$

$$x = \begin{bmatrix} 1/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{bmatrix}, \quad x_{dok} = \begin{bmatrix} 1/(3 + \varepsilon^2) \\ 1/(3 + \varepsilon^2) \\ 1/(3 + \varepsilon^2) \end{bmatrix}$$