ΑΓΑ:Μ 23/1/14

Αριθμητική Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

$(\Sigma)\quad \underset{\substack{\in\mathbb{R}^{n\times n}\\ \text{πυκνό} \\ a_{ij}\ \text{συχνά} \\ \neq 0}}{A}\, x = \underset{\in\mathbb{R}^n}{b}$

Αριθμητικός υπολογισμός λύσης

↓

Αριθμητικός υπολογισμός συντεταγμένων x_i, $i=1,\dots,n$

με τον καλύτερο δυνατό τρόπο

$x_i = \dfrac{\text{αριθμητής}}{\text{παρονομαστή}}$ > απλές αριθμητικές πράξεις, $i=1,2,\dots,n$

Εάν A διαγώνιος, $x_i = \dfrac{b_i}{a_{ii}}$, $i=1,2,\dots,n$

Βασικό μέλημα:

$\underset{\substack{\text{μετασχημα-}\\ \text{τισμός}\\ (PA)}}{A} \longrightarrow \underset{\substack{\text{ειδική}\\ \text{συκολότερη μορφή}\\ \text{π.χ. άνω τριγωνικός}}}{B}$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n \xrightarrow[\text{μετ/μός}]{} \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

για $n=2$

$$M_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -\frac{x_2}{x_1} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Έστω $x_2 \neq 0$, $x_1 \neq 0$

$m = \dfrac{x_2}{x_1}$ πολλαπλασιαστής

Ορισμός: (Μετασχηματισμός Gauss)

Έστω $x \in \mathbb{R}^n$, $x_k \neq 0$, $m = [\underbrace{0,\dots,0}_{k}, m_{k+1},\dots,m_n]^t$,

$m_i = \dfrac{x_i}{x_k}$, $i = k+1,\dots,n$

x_k ↳ οδηγό στοιχείο

Ο πίνακας:

$$M_k = I - m e_k^t = \begin{array}{c} \text{k στήλη} \\ \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ & & & -m_{k+1} & 1 & \cdots & 0 & \\ & & & \vdots & & & & \\ & & & -m_n & 0 & \cdots & 1 & \end{bmatrix} \end{array}$$

$e_k^t = [0 \ldots 1 \ldots 0]^t$, k-θέση

↳ πολλαπλασιαστές

↳ ονομάζεται μετασχηματισμός Gauss

m = διάνυσμα Gauss.

Λήμμα:

Εάν $a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix}$, $a_1 \neq 0$

Υπάρχει ένας μετασχηματισμός Gauss M: $Ma = \text{span}\{e_1\}$

πολλαπλάσιο, $e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$

απόδειξη

Εάν ορίσουμε

$$M = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -\frac{a_2}{a_1} & 1 & & \mathbb{O} \\ -\frac{a_3}{a_1} & & \ddots & \\ \vdots & \mathbb{O} & & \\ -\frac{a_n}{a_1} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad Ma = \begin{bmatrix} a_1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

→ διατηρεί αναλλοίωτη την 1η συντεταγμένη του διανύσματος (οδηγό στοιχείο)

Άσκηση:

Εάν $a_k \neq 0$, να οριστεί μετασχηματισμός Gauss ώστε να μηδενίζει τις εισόδους $k+1, \ldots, n$.

Άνω Τριγωνοποίηση Πίνακα

$$\underset{\in \mathbb{R}^{n\times n}}{A} \xrightarrow[M]{} \underset{\text{άνω τριγωνικός}}{U}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \xrightarrow[M]{} U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Β1 Προσδιορίστε μετ/μό Gauss M_1

$$M_1 \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$M_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -m_{21} & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n1} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}, \quad i = 2, \dots, n$$

$a_{11} \neq 0$ οδηγό στοιχείο

$$A^{(1)} = M_1 A^{(0)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix} \to$$

Β2 Ορίστε μετ/μό $\underset{(n-1)\times(n-1)}{\hat{M}_2}$ $\quad \hat{M}_2 \begin{bmatrix} a_{22}^{(1)} \\ \vdots \\ a_{n2}^{(1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{22}^{(1)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$

$$\hat{M}_2 = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ -m_{32} & 1 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ -m_{n2} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{i2} = \frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, \quad i = 3, \dots, n$$

$a_{22}^{(1)} \neq 0$ οδηγό στοιχείο

Θέτουμε $\underset{n\times n}{M_2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{M}_2 \end{bmatrix}$,

$$A^{(2)} = M_2 A^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}$$

Όμοια διαδικασία για τα υπόλοιπα
Μετά από $(n-1)$ βήματα:

$$\underset{U}{A^{(n-1)}} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ & 0 & & \vdots \\ & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

Σε $(n-1)$ βήματα έχει γίνει η άνω τριγωνοποίηση.

Σχέση $U = A^{(n-1)}$ με A

$$U = A^{(n-1)} = M_{n-1} A^{(n-2)} = M_{n-1} M_{n-2} A^{(n-3)} = \cdots = \underbrace{M_{n-1} M_{n-2} \cdots M_1}_{L_1} A \Rightarrow U = L_1 A$$

Άσκηση:
Εάν $M_i = I - m_i e_i^t$ τότε $\forall$ $\det(M_i) = 1$ άρα αντιστρέφεται $\forall$
$M_i^{-1} = I + m_i e_i^t$

$$L_1^{-1} = M_1^{-1} M_2^{-1} \cdots M_{(n+1)}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & & \\ m_{21} & 1 & & 0 \\ m_{31} & m_{32} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & 1 \end{bmatrix} = L$$

κάτω τριγωνικός με στοιχεία όλους τους πολλ/ές

ΑΓΛ.Μ 23/1/14

$\boxed{A = LU}$, U: άνω τριγωνικός

L: κάτω τριγωνικός με μονάδες στη διαγώνιο

$A: n \times n$

LU-παραγοντοποίηση του πίνακα A

(LU factorization)

6/2/14 Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα: Μπεράδη

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$

↳ L U → άνω τριγωνικός

$\downarrow$ κάτω τριγωνικός
με μονάδες στη
διαγώνιο
(περιέχει πολλ/τές)

Θεώρημα: (Παραγοντοποίηση LU)
Έστω $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, με όλες τις κύριες υποορίζουσες (πάνω αριστεροί $k\times k$ υποπίνακες) $\neq 0$. Τότε ο A έχει μοναδική LU παραγοντοποίηση.

$$A = L \cdot U.$$

L: κάτω τριγωνικός με μονάδες στη διαγώνιο (lower triangular)
U: άνω τριγωνικός (upper triangular)

$\det(A) = \prod_{i=1}^{n} u_{ii}$

↳ determinant = ορίζουσα

απόδειξη

i) Ύπαρξη (κατασκευή)

Έστω ότι έχουμε το k-βήμα

$$A^{(k-1)} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & \cdots \\ & a_{22} & \cdots & \cdots \\ \bigcirc & & a_{kk} & \vdots \\ & & & \ddots \end{bmatrix}$$

πρέπει τα οδηγά στοιχεία $\neq 0$ για να προχωρήσει η κατασκευή.
Η $k\times k$ κύρια υποορίζουσα από την υπόθεση $\neq 0$
Όμως, ισούται με $a_{11} a_{22}^{(1)} \cdots a_{kk}^{(k-1)}$
$\Rightarrow a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$

ii) Μοναδικότητα

$$\left.\begin{array}{l} A = L_1 U_1 \\ A = L_2 U_2 \end{array}\right\} \Rightarrow L_1 U_1 = L_2 U_2$$

$L_2^{-1} L_1 = U_2 U_1^{-1} = I \Rightarrow L_2 = L_1$ και $U_2 = U_1$.

$$\det(A) = \det(LU) = \underbrace{\det(L)}_{=1} \cdot \det(U) = \prod_{i=1}^{n} u_{ii}$$

Άσκηση:

Ο αντίστροφος ενός κάτω τριγωνικού είναι κάτω τριγωνικός. Αντίστοιχα για τον άνω τριγωνικό.

Παρατήρηση:

Εάν κάποια κύρια υποορίζουσα $=0$ ή ο A ιδιάζων ($=$ μη αντιστρέψιμος) τότε η LU μπορεί να υπάρχει αλλά δεν είναι μοναδική.

Παραδείγματα:

1) $A = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ \ell & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \ \ell \in \mathbb{R}$

2) $A = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$ δεν έχει LU.

(Η 1×1 κύρια υποορίζουσά του $=0$)

εντοπίστε άλλα παραδείγματα.

$A = LU \rightarrow$ Αλγόριθμος

Υλοποίηση μέσω εξαλείψεων συντεταγμένων

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & U & a_{2n} \\ \vdots & L & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \qquad m_{21} = \frac{a_{21}}{a_{11}}$$

ΑΓΑ.Μ 6/2/14

Αλγόριθμος

for $k=1,2,\dots,n-1$

B1 Δημιουργία πολλαπλασιαστών

$a_{ik}(\equiv m_{ik}) = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}, \ i=k+1,\dots,n \rightarrow (n-k)$ flops

B2 Ενημέρωση στοιχείων

$$\left.\begin{array}{l} a_{ij} = a_{ij} - m_{ik}a_{kj}, \ i=k+1,\dots,n \\ \qquad\qquad j=k+1,\dots,n \end{array}\right\} (n-k)^2 \text{ flops}$$

end

Πολυπλοκότητα:

$$\sum_{k=1}^{n-1}\{(n-k)^2+(n-k)\} \approx \sum_{k=1}^{n-1}(n-k)^2 \approx \frac{n(n-1)(2n-1)}{6} \approx O\left(\frac{2n^3}{6}\right) = O\left(\frac{n^3}{3}\right) \circledast$$

Άσκηση:

$A^{(1)} = M_1 A^{(0)}$ εξίσωση πινάκων να γίνει εξίσωση συντεταγμένων

$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - m_{i1}a_{1j}^{(0)}, \ i=2,\dots,n, \ j=2,\dots,n$

Εύρεση Ορίζουσας $\xrightarrow{\text{πολυπλοκότητα}} O\left(\frac{n^3}{3}\right)$

Άσκηση

Πολυπλοκότητα Ορίζουσας από Θεωρητικό ανάπτυγμα $(O(n!))$

Είναι ευσταθής ο αλγόριθμος;

Παράδειγμα

$$A = \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Να υπολογιστεί η LU παραγοντοποίηση σε fl.point αριθμητική με $t=3$.

Λύση

$m_{21} = \frac{1}{10^{-4}} = 10^4 \ (>>)$ → Να ΜΗΝ εμφανίζεται μεγάλος πολλ/της

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 10^4 & 1 \end{pmatrix}, \ U = \begin{pmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 0 & \underset{u_{22}}{*} \end{pmatrix}$$

$u_{22} = 1-10^4$

Ζητάμε το $fl(1-10^4)$ για $t=3$

$fl(1-10^4) = -10^4$ για $t=3$

$-10^4 \longrightarrow -1.0000 * 10^4$

$\underline{1 \longrightarrow 0.0001 * 10^4 \ (+)}$

$-0.9999 * 10^4 \xrightarrow{\text{rounding}} -1.000 * 10^4 \Rightarrow$ αγνοείται η ΜΟΝΑΔΑ.

$$LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 10^4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 0 & -10^4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 10^{-4} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \neq A$$

⇒ Ανακριβής παραγοντοποίηση.

Κάνω αντιμετάθεση στον A κι έχω:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-4} & 1 \end{bmatrix}, \quad m_{21} = \frac{10^{-4}}{1} = 10^{-4}$$

Άσκηση:

Να υπολογιστεί η LU παραγοντοποίηση σε fl.point αριθμητική με $t=3$ του $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-4} & 1 \end{bmatrix}$

Υπόδειξη: $fl(1-10^{-4}) = 1$, $LU = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 10^{-4} & 1.0001 \end{bmatrix}$

Υλοποίηση Οδήγησης

$A = LU$ (χωρίς οδήγηση)

$$\begin{array}{rl} & A^1 = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \text{max} \leftarrow a_{k1} & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \end{array}$$

Αλλαγή γραμμών → Μεταθετικός Πίνακας
$\downarrow$
I με αλλαγμένες γραμμές

ΑΓΑ.Μ 6/2/14

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_{P}\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 & 4 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}$$

(permination)

P A ⇝ αλλαγή γραμμών στον A

↓ μεταθετικός

↓ ορθογώνιος

Άνω Τριγωνοποίηση με οδήγηση

$(|m_{ik}| \leq 1)$

Μερική Οδήγηση (Partial Pivoting)

Αναζήτηση του μεγίστου στην τρέχουσα στήλη και τοποθέτηση του στη θέση του οδηγού (με κατάλληλη αναμετάθεση γραμμών)

$A^{(1)} = M_1 A^{(0)}$

↓ μερική οδήγηση

$A^{(1)} = M_1 (\underbrace{P_1 A^{(0)}})$ ↳ αναμετάθεση γραμμών

↓

$A^{(2)} = M_2 (P_2 M_1 (P_1 A^{(0)}))$

↓

Μετά από $(n-1)$ βήματα

$A^{(n-1)} = \underbrace{M_{n-1} P_{n-1} M_{n-2} P_{n-2} \cdots M_1 P_1}_{M \text{ αντιστρέψιμο}} A$

$\overset{\shortparallel}{U}$

$\left.\begin{array}{l} U = MA \Rightarrow A = M^{-1} U \\ \text{Θέτουμε } P = P_{n-1} P_{n-2} \cdots P_1 \\ \qquad L = PM^{-1} \end{array}\right\} \Rightarrow \boxed{PA = LU}$

Αλγόριθμος μερικής οδήγησης.

for $k = 1, 2, \ldots, n-1$

Β0 Εισαγωγή μερικής οδήγησης

Προσδιορισμός δείκτη r_k (η γραμμή)

$|a_{r_k,k}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$

Εναλλαγή γραμμών r_k και k (όχι απαραίτητα να υλοποιηθεί)

B_1 } όπως στον αλγόριθμο Gauss.
B_2 }

end

Παρατήρηση:

Η οδήγηση δεν ασχολείται flops.
Δεν επιβαρύνει με rounding errors.

Πολυπλοκότητα Gauss με μερική οδήγηση.

$$O\left(\frac{n^3}{3}\right) \text{ flops} + \text{συγκρίσεις } [\underbrace{(n-1)}_{1^{η} \text{ στήλη}} + \underbrace{(n-2)}_{2^{η} \text{ στήλη} \ldots} + \cdots + 1] \approx O\left(\frac{n^2}{2}\right)$$

Ολική Οδήγηση (Complete Pivoting)

Αναζήτηση μεγίστου σε όλον τον πίνακα

$$\max_{i,j} |a_{ij}| = a_{r_k s_k} \quad \left\{ \begin{array}{l} \text{Εναλλαγή } k \text{ γραμμής με } r_k \\ \qquad k \text{ στήλης με } s_k \end{array} \right\}$$

$$A^{(1)} = M_1 (\underbrace{P_1 A^{(0)}}_{\text{εναλλαγή γραμμών}} \underbrace{Q_1}_{\text{εναλλαγή στηλών}})$$

Ολική οδήγηση μετά από (n-1) βήματα.

$$\underset{U}{A^{(n-1)}} = \underbrace{M_{n-1} P_{n-1} M_{n-2} P_{n-2} \cdots M_1 P_1}_{M} A \underbrace{Q_1 Q_2 \ldots Q_{n-1}}_{Q}$$

$$\left.\begin{array}{l} U = MAQ \\ P = P_{n-1} P_{n-2} \cdots P_2 P_1 \\ L = PM^{-1} \end{array}\right\} \boxed{PAQ = LU}$$

Αλγόριθμος Ολικής Οδήγησης.

for $k = 1, 2, \ldots, n-1$

  B0. Ολική Οδήγηση

    Προσδιορισμός δεικτών r_k, s_k

    $|a_{r_k s_k}| = \max\{|a_{ij}|, i,j \geq k\}$

ΑΓΑ·Μ 6/2/14

Εναλλαγή k γραμμής με r_k

k στήλης με s_k

$\left.\begin{matrix} B_1 \\ B_2 \end{matrix}\right\}$ όπως η Gauss

end

Πολυπλοκότητα

$O(\frac{n^3}{3})$ flops + συγκρίσεις $\left(\underset{\substack{\downarrow \\ \text{ψάχνω σε } (n-1)\times(n-1) \text{ πίνακα}}}{(n-1)^2} + (n-2)^2 \approx O(\frac{n^3}{3}) \right)$

Παραγοντοποίηση LU

$A = LU$, χωρίς οδήγηση

$PA = LU$, μερική οδήγηση $\left[O(\frac{n^3}{3}) + O(\frac{n^2}{2}) \right]$

$PAQ = LU$, ολική οδήγηση $\left[O(\frac{n^3}{3}) + O(\frac{n^3}{3}) \right]$

τί

13/2/14 Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα Μητρούλη

$A=LU$ Gauss χωρίς οδήγηση → δεν τη χρησιμοποιούμε
$PA=LU$ Gauss μερική οδήγηση → $O(\frac{n^3}{3})+O(\frac{n^2}{2})$ (GPP)
$PAQ=LU$ Gauss ολική οδήγηση → $O(\frac{n^3}{3})+O(\frac{n^3}{3})$ (GCP)

Για να διαλέξουμε μέθοδο ελέγχουμε την ευστάθεια
Ευστάθεια της μεθόδου Gauss
Δε λαμβάνεται υπ'όψη η οδήγηση επειδή θα επηρεάζει τις αριθμητικές πράξεις.
Έστω $A\in\mathbb{R}^{n\times n}$ είναι ο αρχικός πίνακας
$A^{(k)}=(a_{ij}^{(k)})$ για να προχωρήσουμε στο $(k+1)$ γίνονται οι εξής πράξεις

$$A^{(k+1)}=\begin{cases}0 & , i\geq k+1, j=k\\ a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)} & , i\geq k+1, j\geq k+1\\ a_{ij}^{(k)} & , \text{διαφορετικά}\end{cases}$$

Για την ανάλυση σφάλματος
$m_{ik}=fl\left(\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}\right), i\geq k+1$

$a_{ij}^{(k+1)}=fl(a_{ij}^{(k)}-m_{ik}a_{kj}^{(k)})$
Θέλουμε να αποδείξουμε ότι
1) $\underbrace{L\cdot U}_{\text{υπολογίζονται}}=A+\underbrace{E}_{\text{πίνακας σφάλματος}}$

και 2) θα δοθεί φράγμα για τον E $\|E\|_\infty\leq ?\ f(n,u,?)$
Ανάλογα με το φράγμα συμπεραίνουμε για την ευστάθεια

Μελέτη όταν από το $k\to k+1$
$m_{ik}=\frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}(1+\varepsilon), |\varepsilon|\leq u.$

$$\Rightarrow 0=\underbrace{a_{ik}^{(k)}-m_{ik}a_{kk}^{(k)}}_{\text{θεωρητική τιμή}}+\underbrace{a_{ik}^{(k)}\cdot\varepsilon}_{\text{σφάλμα από το μηδενισμό}}$$

$\varepsilon_{ik}^{(k)}$

$fl(x \square y) = (x \square y)(1+\varepsilon)$ ή $\frac{x \square y}{1+\delta}$

$a_{ij}^{(k+1)} = fl(a_{ij}^{(k)} - \underbrace{fl(m_{ik} a_{kj}^{(k)})}_{= m_{ik} a_{kj}^{(k)}(1+\varepsilon_1)}) = \frac{a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}(1+\varepsilon_1)}{1+\varepsilon_2}, \quad |\varepsilon_1|, |\varepsilon_2| \le u \Rightarrow$

$a_{ij}^{(k+1)} = \underbrace{a_{ij} - m_{ik} a_{kj}}_{\text{θεωρητική τιμή}} - \underbrace{m_{ik} a_{kj}^{(k)} \varepsilon_1 - a_{ij}^{(k+1)} \varepsilon_2}_{\text{σφάλμα από την αριθμητική γεωμετρία}}$

$\varepsilon_{ij}^{(k)}$

Έχουμε ότι:

$$\varepsilon_{ij}^{(k)} = \begin{cases} a_{ik}^{(k)} \varepsilon & \\ -a_{ij}^{(k+1)} \varepsilon_2 - m_{ik} a_{kj}^{(k)} \varepsilon_1, & i \ge k+1, j = k \\ 0 & , j, i \ge k+1 \end{cases}$$

$\downarrow$

$\mathcal{E}^{(k)}$, διαφορετικά

$\downarrow$ πίνακας σφάλματος στο k-βήμα.

Εξίσωση Πινάκων στο k-βήμα $\rightarrow \begin{cases} A^{(k)} \\ \mathcal{E}^{(k)} \\ \mathcal{L}^{(k)} \end{cases}$

$$\mathcal{L}^{(k)} = \begin{bmatrix} & \vdots & \\ 0 & m_{k+1,k} & 0 \\ & \vdots & \\ & m_{nk} & \end{bmatrix}$$

$$\boxed{A^{(k+1)} = A^{(k)} - \mathcal{L}^{(k)} A^{(k)} + \mathcal{E}^{(k)}}, \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

$\underbrace{A^{(k)} - \mathcal{L}^{(k)} A^{(k)}}_{\text{θεωρητική τιμή}}$, $\mathcal{E}^{(k)}$: πίνακας σφάλματος στο k-βήμα

Εάν αθροίσουμε τις παραπάνω σχέσεις

$$\underbrace{\mathcal{L}^{(1)} A^{(1)} + \mathcal{L}^{(2)} A^{(2)} + \dots + \mathcal{L}^{(n-1)} A^{(n-1)} + \mathcal{L}^{(n)} A^{(n)}}_{\mathcal{L} = (\mathcal{L}^{(1)} + \mathcal{L}^{(2)} + \dots + \mathcal{L}^{(n-1)} + I) A^{(n)} = U} = \underset{A}{A^{(1)}} + \underbrace{\mathcal{E}^{(1)} + \mathcal{E}^{(2)} + \dots + \mathcal{E}^{(n-1)}}_{\mathcal{E}}$$

Ισχύει ότι $\mathcal{L}^{(k)} A^{(k)} = \mathcal{L}^{(k)} A^{(n)}$

$\downarrow A = A^{(1)}$

$$\mathcal{L}^{(2)} A^{(2)} = \mathcal{L}^{(2)} A^{(n)}$$

Άρα $\mathcal{L} U = A + \mathcal{E}$

ΑΓΑ.Μ 13/2/14

Φράγμα για τον πίνακα σφάλματος

Φράγμα για τον $\mathcal{E}^{(k)}$

$|\varepsilon_{ij}^{(k)}| \leq$

Πρόβλημα

Πόσο μεγαλώνουν τα στοιχεία του A κατά τη διάρκεια της απαλοιφής;

$A=(a_{ij})$, $|a_{ij}|\leq 1$ Έστω g το μέγιστο στοιχείο κατά την απαλοιφή $= \max\limits_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|$

άρα $\underset{\mathcal{E}^{(k)}}{|\varepsilon_{ij}^{(k)}|} \leq \begin{cases} gu, & i\geq k+1,\ j=k \\ 2gu, & i,j\geq k+1 \\ 0, & \text{διαφορετικά} \end{cases}$

Παρατήρηση:

Για να προχωρήσουμε θα πρέπει να είναι φραγμένοι οι πολλαπλασιαστές.
Η οδήγηση εξασφαλίζει ότι $|m_{ik}|\leq 1$

0 σφάλμα γιατί δεν αλλάζει καν

$$\text{άρα } |\mathcal{E}|\leq gu\left\{\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & 2 & \cdots & 2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & 2 & \cdots & 2 \end{bmatrix}}_{\mathcal{E}^{(1)}} + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 2 \cdots & 2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 1 & 2 \cdots & 2 \end{bmatrix}}_{\mathcal{E}^{(2)}} + \cdots + \underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots 0 & 1\ 2 \end{bmatrix}}_{\mathcal{E}^{(n-1)}}\right\}$$

διαιρέσεις για τους πολ/τες άρα σφάλμα 1

συμπλήρωση θέσεων

$$\Rightarrow |\mathcal{E}|\leq gu\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 2 & 2 & \cdots & 2 & 2 \\ 1 & 3 & 4 & 4 & \cdots & 4 & 4 \\ 1 & 3 & 5 & 6 & \cdots & 6 & 6 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & 3 & 5 & 6 & & 2n-4 & 2n-4 \\ 1 & 3 & 5 & 6 & & 2n-3 & 2n-2 \end{bmatrix} \Rightarrow \|\mathcal{E}\|_\infty \leq gu\Big\{\underbrace{\sum_{j=1}^{n-1}(2j-1)+(2n-2)}_{(n^2-1)}\Big\}$$

άθροισμα τελευταίας γραμμής

$$\Rightarrow \|\mathcal{E}\|_\infty \leq gu(n^2-1)=(n^2-1)gu=\underbrace{(n^2-1)u}_{\text{αποδεκτό}}\cdot g \quad (g\leq \|A\|_\infty)$$

Ορισμός: (Συντελεστής Μεγέθυνσης - Growth factor)

$p = \frac{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j,k} |a_{ij}^{(1)}|}$ ← χαρακτηρίζει κάθε φορά τη μέθοδο

ΑΡΑ $\boxed{\|E\|_\infty \leq (n^2-1) p \cdot u \cdot \|A\|_\infty}$

Παρατήρηση:
Η ευστάθεια εξαρτάται από το p

Μελέτη p
GPP $A=[a_{ij}]$, $|a_{ij}| \leq 1 \Rightarrow p \leq 2^{n-1}$
↓ δεν είναι καλό όριο!

GCP πολύ μεγάλο p

Αριθμητικό Παράδειγμα
$A = [a_{ij}]_{n \times n}$, p
για $n=100$, $p=2.1$
$n=1000$, $p=3$

Η Gauss είναι ευσταθής στην πράξη χωρίς θεωρητική απόδειξη.
⇒ Ο, Wilkinson, Cryer θέσπισαν το 1968 την 'Εικασία' → Growth Conjecture → για $A_{n \times n}$ $p(A) \leq n$.
Το 1991 κατασκευάζεται εργαστηριακά πίνακας $A_{13 \times 13}$ με 16 δεκαδικά ψηφία ⇒ $p \leq 13.1$ άρα κατέρριψε την 'Εικασία'

Ανοιχτό πρόβλημα ⇒ $P(A)=n \Leftrightarrow A$ Hadamard (ορθογώνιος με στοιχεία 1, -1) όταν n είναι πολλαπλάσιο του 4 π.χ. $H = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$, $\begin{bmatrix} H & H \\ H & -H \end{bmatrix}$

$p(H_8)=8$, $p(H_{12})=12$, $p(H_{16})=16$

Άρα ούτε η GPP, GCP είναι απόλυτα ευσταθείς ⇒ εμφανίζουν το ίδιο πρόβλημα αλλά προτιμάται η GPP.

20/2/14 Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα: Υπεραύλη

$\underset{n\times n}{A} \rightsquigarrow A = LU$

$\downarrow$ κύριες υποορίζουσες $\neq 0$

L: κάτω τριγωνικός, U: άνω τριγωνικός

$\underset{n\times n}{A}$

↳ συμμετρικός + θετικά ορισμένος

$A = A^t$, $\forall x \in \mathbb{R}^n$, $x^t A x > 0$ (εντοπίζω αντιπαράδειγμα)

Θεώρημα: Παραγοντοποίηση Cholesky.

Εάν $A_{n\times n}$ συμμετρικά θετικά ορισμένος. Τότε υπάρχει μοναδικός άνω τριγωνικός πίνακας G με θετικά διαγώνια στοιχεία:

$A = G^T G$

G^T: κάτω τριγωνικός, G: ↳ άνω τριγωνικός ↳ παράγοντας Cholesky

1) A θετικά ορισμένος $\Rightarrow \det A > 0$ και όλες οι κύριες υποορίζουσες

2) $B = \left[\begin{array}{c|c} B_{11} & B_{12} \\ \hline B_{21} & B_{22} \end{array}\right]$

$\downarrow$ block πίνακας

$\det(B_{11}), \det(B_{22}) \neq 0$ άρα διαγώνια blocks αντιστρέψιμα

$\det(B) = \det(B_{11}) \cdot \det(B_{22} - B_{21} B_{11}^{-1} B_{12})$

$\overset{n}{=}$

$\det(B) = \det(B_{22}) \cdot \det(B_{11} - B_{12} B_{22}^{-1} B_{21})$

(απόδειξη ως άσκηση)

απόδειξη:

Ύπαρξη του G.

$A_{n\times n}$ συμμετρικά θετικά ορισμένος

Υπόθεση: για $(n-1)$ έστω ότι υπάρχει G.

Εάν $A = \begin{bmatrix} A_{n-1} & C \\ C & a_{nn} \end{bmatrix}$ για τον $A_{n-1} = G_{n-1}^T G_{n-1}$, G_{n-1} μοναδικός

Ορίζουμε πίνακα G ως εξής

$G = \begin{bmatrix} G_{n-1} & b \\ 0^t & \sqrt{k} \end{bmatrix}$, $b = (G_{n-1}^T)^{-1} \cdot C \ (\Rightarrow G_{n-1}^T b = C)$

$k = a_{nn} - b^t b > 0$ ↳ μοναδική λύση

Επειδή A θετικά ορισμένος $\Rightarrow \det A > 0$

$\overset{\|}{\text{block μορφή}}$

$\underset{>0}{\det(A_{n-1})} \det(a_{nn} - \underset{>0}{C^T A_{n-1}^{-1} C}) > 0$

$\Rightarrow a_{nn} - b^t b > 0$.

Ο G μοναδικός γιατί b μοναδικό και k μοναδικό

Άρα, πάντα ο A γράφεται $A = G^T G$.

Τρόπος υπολογισμού παραγοντοποίησης Cholesky

$\underset{n\times n}{A} = G^T G$.

Δοθέντος του A, να προσδιοριστεί ο παράγοντας G.

Απευθείας προσδιορισμός της παραγοντοποίησης

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_{11} & & & \\ g_{21} & g_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1n} \\ & g_{22} & \cdots & g_{2n} \\ & 0 & \ddots & \vdots \\ & & & g_{nn} \end{bmatrix}$$

$a_{11} = g_{11}^2 \Rightarrow g_{11} = \sqrt{a_{11}}$ (σημείωση: αν A συμμετρικό θετικά ορισμένος $\Rightarrow a_{ii} > 0$)

⇓

κριτήριο ύπαρξης της ιδιότητας θετικά ορισμένος

Κριτήριο αν $A_{n\times n}$ μη ιδιάζων (δηλ. αντιστρέψιμος)

⇓

Η ύπαρξη της LU (pivots $\neq 0$)

$g_{11} = \sqrt{a_{11}}$

$a_{21} = g_{21} g_{11} \Rightarrow g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}$, $i = 2, \dots, n$

$a_{22} = g_{21}^2 + g_{22}^2 \Rightarrow g_{22}^2 = a_{22} - g_{21}^2$

$a_{32} = g_{31} g_{21} + g_{32} g_{22} \Rightarrow g_{32} = \cdots$

ΑΓΑ:Η 20/2/14

Γενικοί Τύποι:

$g_{11} = \sqrt{a_{11}}$

$g_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{g_{11}}, \quad i=2,\dots,n$

$a_{ii} = \sum_{k=1}^{i} g_{ik}^2$

$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} g_{ik} g_{jk}, \quad j<i$

Αλγόριθμος Cholesky

```
for k = 1, 2, ..., n
    for i = 1, 2, ..., k-1
        g_ki = (1/g_ii) (a_ki - Σ_{j=1}^{i-1} g_ij g_kj)  → i flops
    end
    g_kk = sqrt(a_kk - Σ_{j=1}^{k-1} g_kj^2)  → k flops
end
```

$$g_{ki} = \frac{1}{g_{ii}}\left(a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-1} g_{ij} g_{kj}\right) \longrightarrow i \text{ flops}$$

$$g_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} g_{kj}^2} \rightarrow k \text{ flops}$$

Παρατήρηση:

$k=1$ όχι i $\quad g_{11} = \sqrt{a_{11}}$

$k=2, i=1 \quad g_{21} = \dfrac{a_{21}}{g_{11}}$

$g_{22} = \sqrt{a_{22} - g_{21}^2}$

$k=3, i=1,2 \rightarrow$ Υπολογισμός του G row by row ή column by column.

$g_{31} =$

$g_{32} =$

$g_{33} =$

$$G = \begin{bmatrix} g_{11} & g_{12} & \cdots & g_{1n} \\ & g_{22} & \cdots & g_{2n} \\ & & \ddots & \vdots \\ & & & g_{nn} \end{bmatrix}$$

($g_{21} = g_{12} \rightarrow$ Ο παράγοντας Cholesky είναι συμμετρικός)

Πολυπλοκότητα LU: $O(\frac{n^3}{3})$

Πολυπλοκότητα:

$\sum_{k=1}^{n}\sum_{i=1}^{k-1} i + \sum_{k=1}^{n} k$ + n-τετραγωνικές ρίζες

$\sum_{k=1}^{n}\frac{k(k-1)}{2} \approx \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n} k^2 \approx O(\frac{n^3}{6}) (=\frac{1}{2}LU)$

$Ax = b$ (Σ)

↓

αριθμητικός προσδιορισμός του x, $x_i = \dots$, $i=1,\dots,n$

$Uy = b$

↓

άνω τριγωνικός

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ & & u_{n-1n-1} & u_{n-1n} \\ & & & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_{n-1} \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{bmatrix}$$

Backward Substitution

$y_n = \frac{b_n}{u_{nn}}$

$u_{n-1n-1} y_{n-1} + u_{n-1n} y_n = b_{n-1} \Rightarrow y_{n-1} = \frac{b_{n-1} - u_{n-1n} y_n}{u_{n-1n-1}}$

$\Rightarrow y_i = \frac{1}{u_{ii}} (b_i - \sum_{j=1+i}^{n} u_{ij} y_j)$

Πολυπλοκότητα

Επίλυση άνω τριγωνικό σύστημα

$1+2+\dots+(n-1) \approx O(\frac{n^2}{2})$

Άσκηση:

Πολυπλοκότητα για το κάτω τριγωνικό σύστημα

(απάντηση: $O(\frac{n^2}{2})$).

$Ax = b$

$\hookrightarrow A = LU$

$\left.\begin{array}{l} \\ L\underbrace{Ux}_{y} = b \end{array}\right\} \equiv \begin{array}{l} Ly = b \text{ ως προς } y \\ Ux = y \text{ ως προς } x \end{array}$

ΑΓΑ.Μ 20/2/14

Λύση του (I) με LU

↓ απαιτεί

LU παραγοντοποίηση $\sim O(\frac{n^3}{3})$ flops + άνω - κάτω τριγωνικά συστήματα $\rightarrow O(n^2)$ flops

Gauss με μερική οδήγηση:

$$\left.\begin{array}{l} PA = LU \\ \underbrace{PA}_{LU}x = \underbrace{Pb}_{b'} \end{array}\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} Ly = b' \\ Ux = y \end{array}$$

Δουλεύουμε με επαυξημένο πίνακα $[A \vdots b] \rightarrow [U \vdots b']$

Επιβάρυνση με τον υπολογισμό του Pb.

ip → n (inner products)

matrix vector $Ax \rightarrow n^2$

matrix - matrix $\rightarrow n^3$

Gauss με ολική οδήγηση:

$$\left.\begin{array}{l} PAQ = LU \Rightarrow PA = LUQ^{-1} \\ Ax = b \\ PAx = \underbrace{Pb}_{b'} \end{array}\right\} \underbrace{LU\underbrace{Q^{-1}x}_{y}}_{z} = b' \left.\right\} \Rightarrow \begin{array}{l} Lz = b' \ (\text{ως προς } z) \\ Uy = z \ (\text{ως προς } y) \\ x = Qy \end{array}$$

$x = A \backslash B \rightarrow$ Matlab

Επιβάρυνση με Pb, Qy (2 matrix vectors)

αν $Ax = b$ με Cholesky

↳ είναι συμμετρικά θετικά ορισμένος

Με την κατάλληλη αριθμητική μέθοδο

$$\left.\begin{array}{l} A = G^T G \rightarrow O(\frac{n^3}{6}) \\ G^T \underbrace{Gx}_{y} = b \end{array}\right\} \equiv \begin{array}{l} G^T y = b \\ O(n^2) \quad Gx = y \end{array}$$

27/2/14 Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα: Μητρούλη

ΑΣΚΗΣΕΙΣ

SOS ① Δίνεται ο πίνακας $A = \begin{bmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & 1 \\ -1 & 1 & 4 \end{bmatrix}$ Με ποιον αριθμητικά ευσταθή αλγόριθμο μπορούμε να ελέγξουμε ότι ο πίνακας είναι θετικά ορισμένος;

Λύση

° $A = H \cdot H^T$, όπου H ο κάτω τριγωνικός πίνακας Cholesky °

Θα χρησιμοποιήσουμε Cholesky

Έστω H ένας κάτω τριγωνικός πίνακας: $A = H \cdot H^T$

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & -1 \\ 2 & 4 & 1 \\ -1 & 1 & 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} & & \\ h_{21} & h_{22} & \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} h_{11} & h_{21} & h_{31} \\ 0 & h_{22} & h_{32} \\ 0 & 0 & h_{33} \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$h_{11}^2 = 4 \Rightarrow h_{11} = 2$

$h_{11} h_{21} = 2 \Rightarrow h_{21} = 1$

$h_{11} h_{31} = -1 \Rightarrow h_{31} = -1/2$

$h_{21}^2 + h_{22}^2 = 4 \Rightarrow h_{22}^2 = 3 \Rightarrow h_{22} = \sqrt{3}$

$h_{21} h_{31} + h_{22} h_{32} = 1 \Rightarrow h_{32} = \sqrt{3}/2$

$h_{31}^2 + h_{32}^2 + h_{33}^2 = 4 \Rightarrow h_{33} = \sqrt{3}$

Άρα, υπάρχει ο παράγοντας Cholesky και είναι ίσος με

$$H = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & \sqrt{3} & 0 \\ -1/2 & \sqrt{3}/2 & \sqrt{3} \end{pmatrix}$$

Άρα, ο A είναι θετικά ορισμένος

° Αν κάποιο διαγώνιο στοιχείο στον H ήταν <0 τότε ο A δε θα ήταν θετικά ορισμένος °

② Έστω $A=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 4 & 1 \\ -2 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 3 & 2 & 1 & -1 \end{pmatrix}$

Να προσδιοριστεί η ορίζουσά του με την κατάλληλη αριθμητική μέθοδο. Να σχολιαστεί η ευστάθεια και η υπολογιστική πολυπλοκότητά του.

Λύση

Θα χρησιμοποιήσουμε μέθοδο Gauss με μερική οδήγηση.

1) Εναλλαγή $1 \leftrightarrow 4$ γραμμών

$A=\begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ -2 & 1 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 4 & 1 \end{pmatrix}$

πολ/της: $m_{21}=\frac{a_{21}}{a_{11}}=\frac{-2}{3}$

$a_{22}^{(1)}=a_{22}-m_{21}a_{12}=7/3$

$a_{23}^{(1)}=a_{23}-m_{21}a_{13}=-7/3$

$a_{24}^{(1)}=a_{24}-m_{21}a_{14}=4/3$

πολ/της: $m_{41}=\frac{a_{41}}{a_{11}}=1/3$

$a_{42}^{(1)}=a_{42}-m_{41}a_{12}=-2/3$

$a_{43}^{(1)}=a_{43}-m_{41}a_{13}=11/3$

$a_{44}^{(1)}=a_{44}-m_{41}a_{14}=4/3$

$A^{(1)}=\begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 & -1 \\ 0 & 7/3 & -7/3 & 4/3 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & -2/3 & 11/3 & 4/3 \end{pmatrix}$

πολ/της: $m_{42}=\frac{a_{42}}{a_{22}}=\frac{-2/3}{7/3}=-2/7$

$a_{43}^{(2)}=a_{43}^{(1)}-m_{42}a_{23}^{(1)}=3$

$a_{44}^{(2)}=a_{44}^{(1)}-m_{42}a_{24}^{(1)}=12/7$

ΑΤΑΜ 27/2/14

$$A^{(2)}=\begin{pmatrix}3 & 2 & 1 & -1\\ 0 & 7/3 & -7/3 & 4/3\\ 0 & 0 & 0 & 2\\ 0 & 0 & 3 & 12/7\end{pmatrix}$$

Εναλλαγή των γραμμών $3\leftrightarrow 4$

$$A^{(2)}=\begin{pmatrix}3 & 2 & 1 & -1\\ 0 & 7/3 & -7/3 & 4/3\\ 0 & 0 & 3 & 12/7\\ 0 & 0 & 0 & 2\end{pmatrix}$$

Άρα $\det A = (-1)^{\overset{\text{\# των εναλλαγών που έγιναν}}{\textcircled{\scriptsize 2}}} \det A^{(2)} = 3\,\frac{7}{3}\cdot 3\cdot 2 = 42$

Ο αλγόριθμος είναι ευσταθής τάξης $O(\frac{n^3}{3})$ flops (από θεωρία)

* Στην ολική οδήγηση: $\det A = (-1)^{a+b}\det A^{(a)}$ όπου a = # εναλλαγής γραμμών και b = # εναλλαγής στηλών *

③ Χρησιμοποιώντας αριθμητική κινητής υποδιαστολής, ελέγξτε υπολογίζοντας το σχετικό σφάλμα, αν οι παρακάτω υπολογισμοί είναι ευσταθείς.

(i) $fl(x(y+z))$, $x,y,z\in\mathbb{R}$

(ii) $fl(x_1+\dots+x_n)$, $x_i\in\mathbb{R}^+$

(iii) $fl(\frac{x+y}{c})$, $x,y\in\mathbb{R}^n$, $c\in\mathbb{R}$

(iv) $fl(\sqrt{x_1^2+\dots+x_n^2})$, $x_i\in\mathbb{R}$

Λύση

(i) Πρώτα υπολογίζουμε $a = fl(y+z) = (y+z)(1+\varepsilon_1)$, $|\varepsilon_1|\le u$

$b = fl(x\cdot a) = xa(1+\varepsilon_2)$, $|\varepsilon_2|\le u$

$= x(y+z)(1+\varepsilon_1)(1+\varepsilon_2)$

άρα $fl(x(y+z)) = x(y+z)(1+\delta)^2$, $|\delta|\le u$.

Έτσι, το σχετικό σφάλμα είναι

$$Rel = \left|\frac{fl(x(y+z)) - x(y+z)}{x(y+z)}\right| = \left|\frac{x(y+z)((1+\delta)^2-1)}{x(y+z)}\right| = |(1+\delta)^2-1| = |\cancel{\delta^2}+2\delta|$$

$\delta^2 \ll \delta$ άρα παραλείπεται

Άρα, $Rel = |2\delta| \le 2u$ άρα ο υπολογισμός είναι ευσταθής

(ii) Αποδεικνύεται ότι ισχύει

$$fl(x_1 + \cdots + x_n) = x_1(1+\varepsilon_1) + \cdots + x_n(1+\varepsilon_n) = x_1 + \cdots + x_n + \underbrace{x_1\varepsilon_1 + \cdots + x_n\varepsilon_n}_{\varepsilon}$$
$$= x_1 + \cdots + x_n + \varepsilon,$$

όπου $|\varepsilon| = |x_1\varepsilon_1 + \cdots + x_n\varepsilon_n| \le |x_1||\varepsilon_1| + \cdots + |x_n||\varepsilon_n|$, $|\varepsilon_r| \le (n+1-r)u$, $r=1,\dots,n$

$$\le nu|x_1| + \cdots + |x_n|u = u(|x_1|n + \cdots + |x_n|) \le (|x_1| + \cdots + |x_n|)nu$$

Το σχετικό σφάλμα είναι:

$$Rel = \frac{|fl(x_1 + \cdots + x_n) - (x_1 + \cdots + x_n)|}{|x_1 + \cdots + x_n|} = \frac{|\varepsilon|}{|x_1 + \cdots + x_n|} \le \frac{|x_1| + \cdots + |x_n|}{|x_1 + \cdots + x_n|} nu$$

Άρα ο αλγόριθμος είναι ευσταθής

επειδή $x_i \in \mathbb{R}^+$, αν δεν $\in \mathbb{R}^+$ τότε δε θα μπορούσα να απλοποιήσω άρα δεν θα έβγαζα συμπέρασμα

(iii) $x^t y = (x, y) = x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n$

$$fl(x^t y) = fl(x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n) = x_1 y_1 (1+\varepsilon_1) + \cdots + x_n y_n (1+\varepsilon_n)$$
$$= x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n + \varepsilon, \quad |\varepsilon| = |x_1 y_1 \varepsilon_1 + \cdots + x_n y_n \varepsilon_n|, \quad |\varepsilon_r| \le (n+2-r)u$$
$$\le (|x_1 y_1|(n+1) + \cdots + 2|x_n y_n|)u$$

επειδή έχω $x \cdot y$ δηλ. 2 παράγοντες

Άρα, το σχετικό σφάλμα είναι

$$Rel = \frac{\left|fl\left(\frac{x^t y}{c}\right) - \frac{x^t y}{c}\right|}{\left|\frac{x^t y}{c}\right|} = \left|\frac{\varepsilon}{x^t y}\right| \le (n+1)u \underbrace{\frac{|x|^t |y|}{|x^t y|}}_{K} (1+\delta)$$

$$fl\left(\frac{x^t y}{c}\right) = \frac{(x_1 y_1 + \cdots + x_n y_n)}{c}(1+\varepsilon)(1+\delta), \quad |\delta| \le u$$

αν x, y έχουν ομόσημα στοιχεία $\Rightarrow K=1 \Rightarrow$ ευστάθεια

αν x, y ετερόσημα $\Rightarrow K>1$ άρα δεν μπορώ να κρίνω για την ευστάθεια.

(iv) $fl(\sqrt{x_1^2 + \cdots + x_n^2}) = fl(\|x^t x\|) = fl(\|x\|)$

Χρησιμοποιώντας το (iii) και έχοντας εδώ ότι $K=1 \Rightarrow$ ευστάθεια.

ΑΓΑ:Μ 27/2/14

(4) Δίνεται ένας πίνακας $H \in \mathbb{R}^{n \times n}$ με την ιδιότητα $h_{ij}=0, \forall i>j+1$ (άνω Hessenberg)

(i) Χρησιμοποιώντας απαλοιφή Gauss με μερική οδήγηση, να δοθεί αλγόριθμος άνω τριγωνοποίησης του H. Εκτιμείστε την πολυπλοκότητα.

(ii) Να αποδείξετε ότι το $|h_{ij}^{(k)}| \le k+1$, αν $|h_{ij}| \le 1$.

(iii) Αν $|h_{ij}| \le 1$, να υπολογίσετε το φράγμα του συντελεστή μεγέθυνσης του σφάλματος ρ. Τι συμπεραίνετε για την ευστάθεια της τριγωνοποίησης;

(iv) Να γίνει εφαρμογή του αλγορίθμου για τον πίνακα

$$H=\begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 & 3 \\ 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix}$$

Λύση

(i) Ο πίνακας έχει διαγώνιο + κάτω υποδιαγώνιο με όχι όλα τα στοιχεία 0.

for $k = 1, 2, \dots, n-1$ (θέλω να μηδενίσω την υποδιαγώνιο)
  if $|h_{kk}| < |h_{k+1,k}|$
  B1. Εναλλαγή γραμμών
  $m = \frac{h_{k+1,k}}{h_{kk}} \rightarrow 1$ flop
  for $j = k+1, \dots, n$
  B2 $h_{k+1,j} = h_{k+1,j} - m\, h_{kj} \rightarrow 1$ flop
  end
  end
end

$$\sum_{k=1}^{n-1}\left(1+\sum_{j=k+1}^{n} 1\right) = \sum_{k=1}^{n-1}\left(1+(n-k)\right) = (n-1) + \frac{n^2}{2} - n + \frac{n}{2} \approx O\left(\frac{n^2}{2}\right)$$

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

(ii) $|h_{ij}| \leq 1 \Rightarrow |h_{ij}^{(k)}| \leq k+1$

$$h_{ij}^{(k)} = \begin{cases} 0 , & i \geq k+1,\ j=k \\ h_{ij}^{(k)} - m_{ik} h_{kj}^{(k)} , & i \geq k+1,\ j \geq k+1 \\ h_{ij}^{(k)} & \text{διαφορετικά} \end{cases}$$

$|h_{ij}^{(k)}| \overset{?}{\leq} k+1$

για $k=1$: $|h_{ij}| \leq 1$ από υπόθεση

Έστω ότι ισχύει για k, άρα $|h_{ij}^{(k)}| \leq k+1$

Θ.δ.ο. ισχύει για $k+1$, δηλ. $|h_{ij}^{(k+1)}| \leq |h_{ij}^{(0)} - m_{ik} h_{kj}^{(k)}| \leq 1 + |m| \cdot |h_{kj}^{(k)}|$

$$\leq 1 + |m|(k+1) = k+2$$

$\left(m = \frac{\text{μικρό στοιχείο πίνακα}}{max} < 1 \right)$

(iii)

$$\rho = \frac{\max_{i,j,k} |h_{ij}^{(k)}|}{\max_{i,j} |h_{ij}| = 1} \overset{(ii)}{\leq} k+1$$

$|h_{ij}| \leq 1 \Rightarrow \max_{i,j} |h_{ij}| = 1$

ευσταθής ο αλγόριθμος

(iv) $1 \leftrightarrow 2$ γραμμές

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 6 & 3 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix}$$

πολ/της: $m_{21} = \frac{2}{4} = 1/2$

$a_{22}^{(1)} = a_{22} - m_{21} a_{12} = 3/2$

$a_{23}^{(1)} = a_{23} - m_{21} a_{13} = 5$

$a_{24}^{(1)} = a_{24} - m_{21} a_{14} = 5/2$

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 3/2 & 5 & 5/2 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix}$$

ΑΓΑ-Η 27/2/14

2 ↔ 3 γραμμές

$$A^{(1)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 3/2 & 5 & 5/2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix}$$

πολ/της: $m_{32} = 3/14$

$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - m_{32} a_{23}^{(1)} = 61/14$

$a_{34}^{(2)} = a_{34}^{(1)} - m_{32} a_{24}^{(1)} = 29/14$

$$A^{(2)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 61/14 & 29/14 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \end{pmatrix}$$

3 ↔ 4

$m_{43} = 61/126$

$a_{44}^{(3)} = a_{44}^{(2)} - m_{43} a_{34}^{(2)} = -349/126$

$$A^{(3)} = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 2 & 1 \\ 0 & 7 & 3 & 2 \\ 0 & 0 & 9 & 10 \\ 0 & 0 & 0 & -349/126 \end{pmatrix}$$

mail για τις ασκήσεις: parask_roupa@math.uoa.gr

ΘΕΩΡΙΑ

Hints για την εργαστηριακή άσκηση

① Στις επεκτάσεις του 4x4 σε 5x5

Έλεγχος εάν είναι CP (είναι)

ΓΙΑΤΙ ΠΑΝΤΑ ΟΙ ΕΠΕΚΤΑΣΕΙΣ ΘΑ ΕΙΝΑΙ CP ΠΙΝΑΚΕΣ;

Εάν $(n-1)\times(n-1)$ CP είναι και ο $n\times n$ CP;

② $B = \left[\begin{array}{c|c} A_1 & \cdots \\ \hline \cdots & * \end{array}\right]$

Τι τιμές ορίζουσών του B περιμένουμε; άρα
$\det A_1 = 16$ ή 12
(Εφαρμογή ορίζουσας για Block πίνακα)

Μελέτη Ευαισθησίας των Γραμμικών Συστημάτων

$\underset{\in \mathbb{R}^{n\times n}}{A}\, x = \underset{\in \mathbb{R}^n}{b}$ (Σ)

αριθμητικός προσδιορισμός της λύσης

a_{11} = μεταβολή κατά $1.0e^{-6}$

δηλ. $a_{11}' = a_{11} + 1.0e^{-6}$

Ορισμός (Χαρακτηριστικό των δεδομένων)

Τα δεδομένα είναι σε καλή κατάσταση (well-conditioned) εάν μικρή μεταβολή στα δεδομένα προξενεί μικρή μεταβολή στη λύση. Διαφορετικά, τα δεδομένα είναι σε κακή κατάσταση (ill-conditioned)

π.χ. Πίνακας Hilbert (κλασικό παράδειγμα κακής κατάστασης)

$$H = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 & \cdots & 1/n \\ 1/2 & 1/3 & \cdots & \cdots & 1/n+1 \\ \vdots & \vdots & & & \\ 1/n & 1/n+1 & & & \end{bmatrix}$$

στη MATLAB: hilb(5)

$$\underset{5\times5}{H}\, x = b \longrightarrow \begin{bmatrix} 2.2833 \\ 1.45 \\ 1.0929 \\ 0.8845 \\ 0.7456 \end{bmatrix}$$

$b = [1,1,1,1,1]^t$

Διαταράσσω την $h_{51} = 0.2$ σε $h_{51}' = 0.20001$

ΑΓΑ.Η 27/2/14

MATLAB: $x = H \backslash b$

$$\hookrightarrow \begin{bmatrix} 0.9937 \\ 1.1252 \\ 0.4365 \\ 1.8767 \\ 0.5618 \end{bmatrix} \text{ vs } \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Δεδομένα ευαίσθητα στις μεταβολές

Κριτήρια ευστάθειας της κατάστασης.

Ορισμός. (δείκτης κατάστασης - condition number)

$K_p(A) = \|A\|_p \cdot \|A^{-1}\|_p \quad , \; p = 1, 2, \infty$

Δεδομένα σε καλή κατάσταση εάν το $K(A)$ είναι μικρό (μικρό θεωρείται και το 100). Πάντα $K(A) \geq 1$

$$1 = \|I\| = \|AA^{-1}\| \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$$

$K_2(U) = 1$ αν U ορθόγωνος (γιατί;)

$K(H) \approx O(10^5) \Rightarrow$ πολύ μεγάλο γι' αυτό είναι σε κακή κατάσταση

MATLAB: cond(H)

Έχω $A_{n\times n}$ ill-conditioned, μπορώ να βρω D: $DA \sim$ well-conditioned;

για 2x2 έχει βρεθεί

Θεώρημα Δεξιάς Διαταραχής

$A\,x = b \quad (\Sigma)$

$A(x + \delta_x) = b + \delta b \quad (\Sigma')$

Τότε $(Rel(x) =) \dfrac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq K(A) \dfrac{\|\delta b\|}{\|b\|} (= Rel(b))$

Συμπέρασμα: $Rel(x)$ μικρό μόνο αν $K(A) <<$

απόδειξη:

Από το (Σ') προκύπτει $A\,\delta_x = \delta b \xrightarrow[\text{γιμος}]{\text{A αντιστρέ-}} \delta x = A^{-1}\delta b \xrightarrow[\text{νόρμα}]{\text{Βάζω επαγόμενη}}$

$$\|\delta_x\| = \|A^{-1}\delta b\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\delta b\|$$

το ζητούμενο

Από το $(\Sigma) \Rightarrow \|B\| = \|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$

ΠΡΟΣΟΧΗ! Ιδιότητα της επαγόμενης νόρμας

Άσκηση

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 2 & 4.0001 & 2.002 \\ 1 & 2.002 & 2.004 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 4 \\ 8.0021 \\ 5.006 \end{pmatrix}$$

Ακριβής λύση $x = [1, 1, 1]^t$

Είναι ευαίσθητο στις μεταβολές;

Εύρεση του $\kappa(A)$

B1. Εύρεση του A^{-1} (Gauss-Jordan)

B2. Απ' ευθείας υπολογισμός $\|A\|_\infty \|A^{-1}\|_\infty$

Εδώ βγαίνει $\kappa(A) \approx O(10^5)$

Μεγάλο $\kappa(A)$ και από το θεώρημα: μικρή μεταβολή στο x δεν εγγυάται μικρή μεταβολή στο b.

ii) αν $b_1 = 4.00003$ τι αλλαγή γίνεται στο x; η προηγούμενη απάντηση.

6/3/14 Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα: Μπεράλη

Θεώρημα Αριστερής Διαταραχής

$$\left.\begin{array}{l} \|A\|\cdot\|A^{-1}\|=\kappa(A) \leftarrow Ax=b\ (\Sigma) \\ (A+\Delta A)(x+\delta x)=b\ (\Sigma') \\ \text{Υπόθεση: } \|\Delta A\| < \frac{1}{\|A^{-1}\|} \end{array}\right\} \Rightarrow \underbrace{\frac{\|\delta x\|}{\|x\|}}_{Rel(x)} \le \frac{\kappa(A)}{\underbrace{(1-\kappa(A))\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}_{1-\|A^{-1}\|\|\Delta A\|}} \cdot \underbrace{\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}_{Rel(A)} \Rightarrow$$

$\downarrow$

είναι ρεαλιστική; ναι γιατί $\|\Delta A\|\cdot\|A^{-1}\|<1$, αληθεύει πάντα αφού $\|\Delta A\| <<$.

$\Rightarrow Rel(x)$ μικρό μόνο εάν $\kappa(A)$ μικρό.

απόδειξη

Από το (Σ') προκύπτει ότι $\delta x = -A^{-1}\cdot\Delta A(x+\delta x) \xrightarrow[\text{νόρμα}]{\text{Βάζουμε}}$

$\|\delta x\| \le \|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|\cdot\|x+\delta x\| \Rightarrow$

$\|\delta x\| \le \|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|\cdot(\|x\|+\|\delta x\|) \Rightarrow$

$\left(1-\|A^{-1}\|\frac{\|A\|}{\|A\|}\|\Delta A\|\right)\|\delta x\| \le \frac{\|A\|\,\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|}{\|A\|}\cdot\|\delta x\|.$

∘ Πολλ/ζω και διαιρώ με την $\|A\|$ για να εμφανιστεί το $\kappa(A)$ ∘

Επειδή $\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|<1 \Rightarrow$ ο συντελεστής του $\|\delta x\|$ είναι >0 άρα διαιρώ κ

έχω: $\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\frac{\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|}{\|A\|}}{1-\frac{\|A\|\cdot\|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\|}{\|A\|}} \Rightarrow$ ζητούμενο

Θεώρημα Γενικής Διαταραχής

$$\left.\begin{array}{l} Ax=b\ (\Sigma) \\ (A+\Delta A)(x+\delta x)=(b+\delta b)\ (\Sigma') \\ \text{Υπόθεση: } \|\Delta A\|\cdot\|A^{-1}\|<1 \end{array}\right\} \Rightarrow Rel(x)=\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\kappa(A)}{(1-\kappa(A))\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}}\underbrace{(Rel(A)+Rel(b))}_{\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}+\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}}$$

Ισχύει για όλα τα θεωρήματα: $\Rightarrow$ Εάν $(Rel(A)+Rel(b))$ είναι πολύ μικρά, το $Rel(x)$ θα είναι κι αυτό πολύ μικρό μόνο εάν το $\kappa(A)$ είναι μικρό.

απόδειξη

Από το (Σ') έχουμε

$(A+\Delta A)\delta x + Ax + \Delta A x - \overset{=b}{Ax} = \delta b \Rightarrow (A+\Delta A)\delta x + \Delta A x = \delta b \Rightarrow$

$(A+\Delta A)\delta x = \delta b - \Delta A x$

∘ Από Λογισμό Πινάκων: Εάν Fnxn: $\|F\|<1 \Rightarrow (I-F)$ αντιστρέψιμος και $\|(I-F)^{-1}\| \le \frac{1}{1-\|F\|}$ ∘

$$(A+\Delta A)\delta x = A(I - \underbrace{A^{-1}(-\Delta A)}_{F})\delta x$$

$\|F\| = \|A^{-1}(-\Delta A)\| \le \|A^{-1}\|\,\|\Delta A\| < 1$

$$\Rightarrow \delta x = (I-F)^{-1} A^{-1}(\delta b - Ax) \xrightarrow[\text{νόρμα}]{\text{Βάζω}}$$

$$\|\delta x\| \le \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|F\|}\left(\|\delta b\| + \|\Delta A\|\cdot\|x\|\right) \xrightarrow[\|x\|]{\text{Διαιρώ με}}$$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|A^{-1}\|}{1-\|F\|}\left(\frac{\|\delta b\|}{\|x\|} + \frac{\|\Delta A\|\cdot\|x\|}{\|x\|}\right) \quad ①$$

$$\frac{1}{\|x\|} \le \frac{\|A\|}{\|b\|} \quad ② \quad \left(b = Ax \Rightarrow \|b\| \le \|A\|\cdot\|x\|\right)$$

Από ① και ②: $\dfrac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \dfrac{\|A^{-1}\|\cdot\|A\|}{1-\|F\|}\left(\dfrac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \dfrac{\|\Delta A\|}{\|A\|}\right)$ ③

$$\|F\| \le \|A^{-1}\|\cdot\|\Delta A\| = \frac{\|A^{-1}\|\cdot\|A\|}{\|A\|}\cdot\|\Delta A\| \quad ④$$

$\|F\| < 1$ ⑤

Από ③, ④, ⑤: προκύπτει το ζητούμενο.

Ανάλυση Ευαισθησίας

A → υπολογισμός του $\kappa(A)$

Εφαρμογή των θεωρημάτων

Αποδείξεις θεωρημάτων γιατί μπορεί να ζητηθούν ως ασκήσεις.

Παραγοντοποίηση Πίνακα

$\underset{n\times n}{A} = LU$

Παραγοντοποίηση με ορθογώνιο πίνακα

$\underset{n\times n}{A} = QR$

ορθογώνιος → άνω τριγωνικός

ΑΓΑ.Μ 6/3/14

Ορισμός: Πίνακας Householder

Για $u \in \mathbb{R}^n, u \neq 0$, $\boxed{H_u = I - 2\frac{uu^T}{u^Tu}}$ → πίνακας Householder

$u \to u^Tu = \|u\|_2^2 \in \mathbb{R}$

$\underset{n\times 1}{u} \cdot \underset{1\times n}{u^T} \Rightarrow n\times n$ πίνακας

$H = I - 2\frac{uu^T}{\|u\|_2\|u\|_2} = I - 2vv^T,\ \|v\|_2^2 = 1$

Ιδιότητες.

1) H ~ συμμετρικός

2) H ~ ορθογώνιος $(HH^T = I)$

απόδειξη

Προκύπτει άμεσα από $H = I - 2vv^T$

Ερώτημα

Δοσμένου $x \in \mathbb{R}^n$, υπάρχει δυνατότητα μηδενισμού των συντεταγμένων του με πίνακα Householder;

Επιλογή u: $H_u \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = span\{e_1\}$

Λήμμα.

Έστω $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$, $\sigma = \pm\|x\|_2$, $x \neq -\sigma e_1 = \begin{bmatrix} -\sigma \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$

Εάν $u = x + \sigma e_1$ τότε $\boxed{H_u x = \underbrace{-\sigma e_1}_{= span\{e_1\}}}$ ⊛

απόδειξη (ως άσκηση)

$Hx = \left(I - \underbrace{2\frac{uu^T}{u^Tu}}_{\beta^{-1}}\right)x = x - \frac{uu^Tx}{\beta}$

Υπολογισμός β.

$\frac{1}{2}u^Tu = \frac{1}{2}(x+\sigma e_1)^T(x+\sigma e_1) = \frac{1}{2}(\underbrace{x^Tx}_{\sigma^2} + 2x_1\sigma + \sigma^2) = \sigma^2 + x_1\sigma$

Τελικά, $Hx = x - \frac{(x+\sigma e_1)(x+\sigma e_1)^Tx}{\sigma^2 + \sigma x_1} = x - \frac{(x+\sigma e_1)(\overbrace{x^Tx}^{=\sigma^2} + \sigma x_1)}{\sigma^2 + \sigma x_1} = x - x - \sigma e_1 = -\sigma e_1$

$Hx = -\sigma e_1$

$\hookrightarrow u = x + \sigma e_1$

$\sigma = \pm \|x\|_2$

Αριθμητικά, ποια επιλογή θα ακολουθήσω;

Επιλέγουμε το $\sigma = \text{sign}(x_1) \cdot \|x\|_2 \rightsquigarrow$ έτσι αποφεύγονται πιθανά σφάλματα.

Αλγόριθμος Μηδενισμός εισόδων διανύσματος με Householder

Input $\rightarrow x \in \mathbb{R}^n,\ x \neq 0$

Output $\rightarrow u \in \mathbb{R}^n,\ -\sigma e_1$

Σχόλιο

Για την υλοποίηση του $Hx = \left(I - 2\frac{uu^T}{u^T u}\right)x = -(\sigma, 0, \dots, 0)^T \Rightarrow$ δεν θα γίνεται ο αναλυτικός υπολογισμός του H και το γινόμενο αλλά κατ' ευθείαν το αποτέλεσμα.

Αλγόριθμος House 1 (*)

$m = \max|x_i|,\ i = 1, 2, \dots, n$

$u_i = \frac{x_i}{m},\ i = 1, 2, \dots, n \rightarrow n$ flops

$\sigma = \text{sign}(u_1) \cdot \sqrt{u_1^2 + \dots + u_n^2} \rightarrow n$ flops + 1 τετρ. ρίζα

$\left.\begin{array}{l} u_1 = u_1 + \sigma \\ \sigma = -m\sigma \end{array}\right\}$ 2 flops

Άρα πολυπλοκότητα $2n + 2 \cong O(n)$

Παραγοντοποίηση QR

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

Για να γίνει ο A άνω τριγωνικός.

B1 Να υπολογιστεί διάνυσμα u_n: $H \begin{bmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$

$x \in \mathbb{R}^n,\ x \neq 0 \rightsquigarrow u_n = x + \text{sign}(a_{11}) \cdot \|x\|_2 \cdot e_1$

ΑΓΑ-Μ 6/3/14

$$A^{(1)} = H_1 A = \begin{bmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & * \\ \vdots & & & \vdots \\ 0 & * & \cdots & * \end{bmatrix}$$

<u>Β2</u> Επιλογή u_{n-1}: $\underset{(n-1)\times(n-1)}{\hat{H}_2} \begin{bmatrix} * \\ * \\ \vdots \\ * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} * \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$

$$H_2 = \begin{bmatrix} 1 & \\ & \hat{H}_2 \end{bmatrix}$$

$A^{(2)} = H_2 A^{(1)}$

Μετά από $(n-1)$ βήματα

$A^{(n-1)} = R$ άνω τριγωνικός

$A^{(n-1)} = H_{n-1} A^{(n-2)} = \underbrace{H_{n-1} H_{n-2} \cdots H_2 H_1}_{\text{γινόμενο πινάκων Householder} \Rightarrow \text{ορθογώνιος πίνακας} = Q^T} A$

Άρα, $R = Q^T A \Rightarrow QR = A$

όπου Q ορθογώνιος, $Q^T = H_{n-1} H_{n-2} \cdots H_2 H_1 \Rightarrow (Q^T)^T = Q = H_1 H_2 \cdots H_{n-2} H_{n-1}$

<u>Θεώρημα</u> QR παραγοντοποίηση πίνακα

Έστω $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, τότε υπάρχει ορθογώνιος πίνακας $Q_{n\times n}$ και άνω τριγωνικός $R_{n\times n}$: $\boxed{A = QR}$

<u>απόδειξη</u>

κατασκευαστική με μετασχηματισμό Householder

$A_{m\times n}$

αν $m \geq n$:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \\ \hline 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{matrix} \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ 0 & 0 & 0 \end{matrix}$$

αν $m < n$:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R & \vdots & S \end{bmatrix}$$

13/3/14 Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα Μητράλη

Παραγοντοποίηση QR με μετασχηματισμούς Householder

$$A = Q \cdot R$$

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ ορθογώνιος, $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ άνω τριγωνικός

Ψάχνω H τέτοιο ώστε $H_1 \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

$$\underset{(n-k+1)\times(n-k+1)}{\hat{H}_k} \begin{pmatrix} x_k \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$H_k = \begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 \\ 0 & \hat{H}_k \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{c} \\ H_k \cdot A^{(k-1)} = \end{array}
\begin{array}{c} \qquad\qquad k\text{ στήλη} \\ \qquad\qquad\downarrow \\ \begin{pmatrix} * & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & * & \cdots & \cdots & * \\ 0 & 0 & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \sigma & & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & * \end{pmatrix} \end{array}$$

Αλγόριθμος (εύρεσης πίνακα R)

$Q = I$

for $k = 1, \ldots, n-1$

  $\underline{u}_{n-k+1} = \text{house1}(A_{k:n,k}) \rightarrow 2(n-1)$ flops (I)

  $a_{kk} = \sigma$

  $A_{k+1:n,k} \equiv \underline{u}_{k+1:n}$ $\underline{u}_{k+1-n} = \begin{bmatrix} u_k \\ u_{k+1} \\ \vdots \\ u_n \end{bmatrix} \rightarrow$ στων μηδενικών τη θέση η αποθήκευση. ($u_k \rightarrow v_k$)

  $v_k = u_k$

  $b = \dfrac{2}{\underline{u}^T_{n-k+1}\underline{u}_{n-k+1}} \rightarrow (n-k+2)$ flops. (II)

  ενημέρωση υπόλοιπου πίνακα

  for $j = k+1, \ldots, n$

    $s = b \sum_{i=1}^{n} u_{ik} a_{ij} \rightarrow (n-k+2)$ flops (III)

    $a_{ij} = a_{ij} - s u_{ik}$, $i = k, \ldots, n \rightarrow (n-k+1)$ flops (IV)

    (III), (IV): $= H_k A^{(k-1)}$

  end

end

Από (III) και (IV) $\rightsquigarrow$ for $j = \underbrace{k+1, \dots, n}_{n-k \text{ φορές}}$ άρα $2(n-k)(n-k) = 2(n-k)^2$ (V)

Από (I) (II), (V) $\rightsquigarrow$ for $k=1, \dots, n-1$

$$\sum_{k=1}^{n-1} \left(\underbrace{2(n-1) + (n-k)}_{O(n^2)} + \underbrace{2(n-k)^2}_{O(n^3)} \right) = 2 \sum_{k=1}^{n-1} (n^2 - 2nk + k^2) + O(n^2)$$

$$= 2\left[\sum n^2 - 2n \sum k + \sum k^2\right] + O(n^2) = 2\left(n^3 - 2n\frac{n^2}{2} + \frac{2n^3}{6}\right) + O(n^2) = O\left(\frac{2n^3}{3}\right)$$

Αλγόριθμος House 1

$m = \max|x_i|, \ i = 1, \dots, n$

$(u_i \equiv)\ x_i = \frac{x_i}{m}, \ i = 1, \dots, n$ (← για την αποφυγή υπερχείλισης) → n flops

$\sigma = \sqrt{u_1^2 + \dots + u_n^2}$ → n flops

$u_1 \equiv x_1 = u_1 + \sigma$ → 1 flop

$\sigma = m \cdot \sigma$ → 1 flop (**)

Συνολικά $2(n-1)$ flops

(**) για τον $Q = H_1 H_2 \cdots H_n$

for $j = 1, \dots, n$

$s = 0$

for $i = k:n$

$s = s + u_i a_{ij}$

end

$s = b \cdot s$

$a_{ij} = a_{ij} - s u_i, \ i = k, \dots, n$

end

Για την επίλυση συστήματος

$Ax = b$

$\frac{2n^3}{3} \to QRx = b$

$\underbrace{Q^T Q}_{I} Rx = Q^T b \quad O(n^2)$

$Rx = Q^T b$

$\hookrightarrow O\left(\frac{n^2}{2}\right)$

ΑΓΑ:Ν 13/3/14

$LU \to O\left(\frac{n^3}{3}\right) \to$ ευσταθής στην πράξη

vs

$QR \to O\left(\frac{2n^3}{3}\right) \to$ ευσταθής

Ανάλυση σφάλματος

$\hat{Q}\hat{R} = A + E$

ευσταθής $\|E\|_2 = f(n, u, A)$

Επίλυση γραμμικού συστήματος με LU μερικής οδήγησης