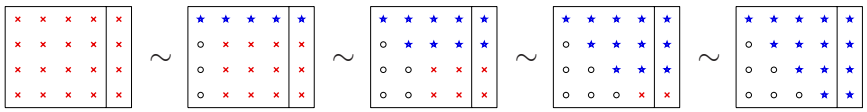
2.2. Gauss elimination

Resumé: Trin 1: $\boldsymbol{T} = \left(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}\right) \sim \left(\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c}\right)$

Trin 2: Løs $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}$ (vha tilbageløsning)

Trin 1: Successiv elimination af x_k fra ligning $k{+}1, \ldots, n$



$\times$: Element i aktive del af systemet

$\star$: Element i $\left(\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c}\right)$

Værktøj: Elementar-operationer, som ikke ændrer løsningen

1° Ombyt to ligninger, dvs rækker i $\boldsymbol{T}$.

2° Modificér en ligning ved at subtrahere et multiplum af en af de andre ligninger.

Ad 1° Ombytning er nødvendig hvis $a_{kk} = 0$. Pivotering forøger nøjagtigheden af den beregnede løsning: Før nul-stilling i k^{te} søjle bestemmes

$$p_k \;:\; |a_{p_k,k}| = \max\{|a_{kk}|, \ldots, |a_{nk}|\} \; .$$

Hvis $p_k > k$, så ombyt p_k^{te} og k^{te} ligning.

Ad 2° $\boldsymbol{T}_{i,:} \leftarrow \boldsymbol{T}_{i,:} - \ell_{ik}\boldsymbol{T}_{k,:}$, hvor $\ell_{ik} = a_{ik}/a_{kk}$ er den såkaldte eliminations-koefficient. Nye koefficient til x_k i den i^{te} ligning:

$$a_{ik} - \frac{a_{ik}}{a_{kk}} a_{kk} \;=\; 0 \; .$$

Vi slap altså af med bidrag fra x_k .

Pivotering medfører, at alle $|\ell_{ik}| \le 1$.
Uden pivotering er der risiko for, at bidraget $-\ell_{ik}\boldsymbol{T}_{k,:}$ "drukner" informationen i den "gamle" i^{te} ligning.

Vil antage, at matricen $\boldsymbol{A}$ er regulær $\Leftrightarrow$ alle $u_{ii} \neq 0$, og løsningen $\boldsymbol{x}$ er éntydig.

2.4. Invers matrix pp 29 – 32

Givet $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ og $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n\times q}$. Matrix ligning

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{X}_{:,j} = \boldsymbol{B}_{:,j} \;\; \text{for } j = 1, 2, \ldots, q$$

Disse q ligningssystemer kan løses én ad gangen.
Samme beregninger på elementer i $\boldsymbol{A}$ ☹

Nok så smart: Udvid totalmatricen $\left(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{B}\right) \sim \left(\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{C}\right)$ ☺

Eksempel 2.10.

$$\left(\begin{array}{cc|cc} 2 & 3 & 1 & 0 \\ 4 & 5 & 0 & 1 \end{array}\right) \underset{p_1 = 2}{\sim} \left(\begin{array}{cc|cc} 4 & 5 & 0 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 0 \end{array}\right) \underset{\ell_{21} = \frac{1}{2}}{\sim} \left(\begin{array}{cc|cc} 4 & 5 & 0 & 1 \\ 0 & \frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \end{array}\right)$$

Tilbageløsning (emne for en opgave) giver $\boldsymbol{X} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -5 & 3 \\ 4 & -2 \end{pmatrix}$

Specielt interesseret i $\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{I}$, enhedsmatricen.
Forudsætter at $\boldsymbol{A}$ er regulær. Så er løsningen $\boldsymbol{X}$ éntydig.

Det er den inverse matrix, $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}^{-1}$. Fx $\begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}^{-1} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} -5 & 3 \\ 4 & -2 \end{pmatrix}$

$$\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{A}^{-1} \;=\; \boldsymbol{I}$$

Side 30 vises, at $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \;=\; \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{x} \;=\; \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$

og at også $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} \;=\; \boldsymbol{I}$ (Normalt er $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}$)

Ortogonal matrix $\boldsymbol{Q}$: $\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q} \;=\; \boldsymbol{I}$. $\boldsymbol{Q}^{-1} \;=\; \boldsymbol{Q}^T$
Også $\boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{Q}^T \;=\; \boldsymbol{I}$, dvs også $\boldsymbol{Q}^T$ er ortogonal.

NB: "$\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$" skal ikke opfattes som en beregningsforskrift, men som kort formulering af " *find løsningen til ligningssystemet* $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ "

Brug `x = A \ b` . Det er mere effektivt og mere nøjagtigt end både
`x = (A \ eye(n)) * b` og `x = inv(A) * b`

2.5. LU faktorisering. pp 33 – 36

$$\boldsymbol{T} = \left(\boldsymbol{A} \mid \boldsymbol{b}\right) \sim \left(\boldsymbol{U} \mid \boldsymbol{c}\right) \quad \text{opnås ved en følge af}$$

1° Rækkeombytninger: $\boldsymbol{T}_{k,:} \leftrightarrow \boldsymbol{T}_{p_k,:}$

2° Rækkeoperationer: $\boldsymbol{T}_{i,:} \leftarrow \boldsymbol{T}_{i,:} - \ell_{ik}\boldsymbol{T}_{k,:}$

Effekten på kefficientmatricen kan udtrykkes ved

LU faktorisering af $\boldsymbol{A}$: $\boldsymbol{P}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$

$\boldsymbol{U}$: Den resulterende øvre trekantmatrix

$\boldsymbol{P}$: Opsamler rækkeombytningerne. Permutationsmatrix.

$\boldsymbol{L}$: Enheds nedre trekantmatrix, dvs $(\boldsymbol{L})_{ii} = 1$.
Eliminationskoefficienter i strengt nedre trekant.
$(\boldsymbol{L})_{ik} \leftarrow \ell_{ik}$. Skifter række hvis efterfølgende $p_j > j$.

Eksempel 2.16 – 2.17.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} \underset{\substack{p_1 = 3 \\ \ell_{21} = \frac{4}{7} \\ \ell_{31} = \frac{1}{7}}}{\sim} \begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 0 & \frac{3}{7} & \frac{6}{7} \\ 0 & \frac{6}{7} & \frac{12}{7} \end{pmatrix}$$

$$\underset{\substack{p_2 = 3 \\ \ell_{32} = \frac{1}{2}}}{\sim} \begin{pmatrix} 7 & 8 & 9 \\ 0 & \frac{6}{7} & \frac{12}{7} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{U} .$$

Nu skal " $\sim$ " læses "omformes til".

$\boldsymbol{P}$ fremkommer fra $\boldsymbol{I}$ når den underkastes de samme rækkeombytninger

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \underset{p_1 = 3}{\sim} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \underset{p_2 = 3}{\sim} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} = \boldsymbol{P} .$$

$\boldsymbol{P}$ er en ortogonal matrix; $\boldsymbol{P}^{-1} = \boldsymbol{P}^T$.

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{7} & 1 & 0 \\ \frac{4}{7} & \frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix}$$

Højresiden $\boldsymbol{b}$ optræder ikke i faktoriseringen, men

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{P}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{U}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{b}$$

Kan løses i to trin

1° løs $\boldsymbol{L}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{b}$ (Samme ombytninger i højresiden. Fremadløsning)

2° løs $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}$ (Tilbageløsning)

Eksempel 2.21. Hvad koster det ? Traditionelt nøjes man med at tælle antallet af flops (floating point operations), dvs simple aritmetisk operationer.

Beregning af LU faktoriseringen koster $\left(\frac{2}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{6}n\right)$ flops . For store n dominerer det første led, og vi nøjes med at medtage dette.

Ca antal flops til beregning af	$\boldsymbol{P}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$	løsn. af $\boldsymbol{L}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{b}$	løsn. af $\boldsymbol{U}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{c}$	$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{A}^{-1}$
	$\frac{2}{3}n^3$	n^2	n^2	$2n^2$	$2n^3$

2.6. SPD systemer pp 36 – 40

$\boldsymbol{A}$ er SPD hvis den er symmetrisk : $\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}$ dvs $a_{ij} = a_{ji}$
og positivt definit : $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} > 0$ for alle $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$

Eksempel 2.22. $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F}$, hvor $\boldsymbol{F} \in \mathbb{R}^{m\times n}$. (Normalligninger)

$\boldsymbol{A}$ er symmetrisk: $\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{F}^T(\boldsymbol{F}^T)^T = \boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F} = \boldsymbol{A}$

Hvis $\boldsymbol{F}$ har lineært uafhængige søjler, så er $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{F}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ hvis $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$, og

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{F}^T\boldsymbol{F}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y} = y_1^2 + \cdots + y_m^2 > 0 \quad \boldsymbol{A} \text{ er SPD}$$

Rækkeombytninger ødelægger symmetrien. Undlad pivotering. Kan vises, at det ikke ødelægger nøjagtigheden. Dvs $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{I}$ og $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$

Eksempel 2.23.

$$\begin{pmatrix} 4 & 12 & -8 & 16 \\ 12 & 45 & -33 & 66 \\ -8 & -33 & 41 & 30 \\ 16 & 66 & 30 & 502 \end{pmatrix} \underset{\substack{\ell_{21}=3 \\ \ell_{31}=-2 \\ \ell_{41}=4}}{\sim} \begin{pmatrix} 4 & 12 & -8 & 16 \\ 0 & 9 & -9 & 18 \\ 0 & -9 & 25 & 62 \\ 0 & 18 & 62 & 438 \end{pmatrix} \underset{\substack{\ell_{32}=-1 \\ \ell_{42}=2}}{\sim}$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 12 & -8 & 16 \\ 0 & 9 & -9 & 18 \\ 0 & 0 & 16 & 80 \\ 0 & 0 & 80 & 402 \end{pmatrix} \underset{\ell_{43}=5}{\sim} \begin{pmatrix} 4 & 12 & -8 & 16 \\ 0 & 9 & -9 & 18 \\ 0 & 0 & 16 & 80 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} = \boldsymbol{U}$$

☺ Symmetri bevares. Regn kun på halvdelen. $\frac{1}{3}n^3$ flops.

$$\boldsymbol{L} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ 3 & 1 & & \\ -2 & -1 & 1 & \\ 4 & 2 & 5 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{U} = \begin{pmatrix} 4 & & & \\ & 9 & & \\ & & 16 & \\ & & & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 & 4 \\ & 1 & -1 & 2 \\ & & 1 & 5 \\ & & & 1 \end{pmatrix} = \boldsymbol{D}\,\boldsymbol{L}^T$$

Generelt for en symmetrisk matrix: LDL faktorisering : $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{L}^T$

Bør kun bruges hvis $\boldsymbol{A}$ også er PD. Er den det ?

$\boldsymbol{L}^T$ har lineært uafhængige søjler og derfor er $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ hvis $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$.

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{L}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{y} = d_{11}y_1^2 + d_{22}y_2^2 + \cdots + d_{nn}y_n^2$$

M.a.o: $\boldsymbol{A}$ er PD hvis og kun hvis alle $d_{ii} > 0$ dvs alle $u_{ii} > 0$

Stop beregningerne hvis man møder en $u_{ii} \leq 0$. Så skal man begynde forfra med den generelle metode med pivotering.

$\boldsymbol{A}$ SPD : $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{D}\,\boldsymbol{L}^T = \left(\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{D}^{1/2}\right)\left(\boldsymbol{D}^{1/2}\boldsymbol{L}^T\right) = \boldsymbol{C}\,\boldsymbol{C}^T$

Cholesky faktorisering. Beregnes normalt uden omvejen via LDL faktoriseringen.

$\boldsymbol{C}$ er en nedre trekantmatrix.

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{C}\,\boldsymbol{C}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

Løses i to trin

1° løs $\boldsymbol{C}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{b}$ (Fremadløsning)

2° løs $\boldsymbol{C}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$ (Tilbageløsning)

Eksempel 2.27 – 2.28. MATLAB : Bruger $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^T\boldsymbol{R}$, $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{C}^T$. Øvre trekantmatrix.

```
x = A \ b
```

Metoden afhænger af $\boldsymbol{A}$:

1° Hvis $\boldsymbol{A}$ er en øvre (nedre) trekantmatrix, bruges tilbage- (fremad-) løsning.

2° Hvis $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$ forsøges Cholesky faktorisering. Hvis det lykkes, bruges $\boldsymbol{C}$ til at løse systemet. Ellers startes forfra med den generelle metode.

3° Generelle metode: Beregn LU faktoriseringen af $\boldsymbol{A}$, og brug den til at løse systemet.