

2. ΜΕΘΟΔΟΣ ΑΠΑΛΟΙΦΗΣ GAUSS

Έστω $Ax = b$ ένα γραμμικό σύστημα $n \times n$. Στη μέθοδο απαλοιφής Gauss, μετατρέπουμε πρώτα το σύστημα αυτό σε ένα ισοδύναμο σύστημα $A'x = b'$, με **άνω-τριγωνικό** πίνακα A' (δηλ. με $a'_{ij} = 0$ για $i > j$), και κατόπιν λύνουμε εύκολα το προκύπτον σύστημα $A'x = b'$ με διαδοχικές αντικαταστάσεις αγνώστων. Η μέθοδος αποτελείται από δύο φάσεις, την τριγωνοποίηση (ή κλιμακοποίηση) και την πίσω-αντικατάσταση (ή οπισθοδρόμηση). Στις παρακάτω πράξεις, χρησιμοποιούμε τον **επαυξημένο πίνακα** $[A|b]$.

ΤΡΙΓΩΝΟΠΟΙΗΣΗ. Σε διαδοχικά βήματα $k = 1, \dots, n-1$, απαλείφουμε το x_k από τις εξισώσεις $k+1$ έως n . Στο βήμα k , παίρνουμε τον ακόλουθο επαυξημένο πίνακα με νέους συντελεστές a_{ij} και δεύτερα μέλη b_i

$$p_i = a_{ik} / a_{kk} \quad \mathbf{O} \quad \left[\begin{array}{cccccc|c} a_{11} & \dots & a_{1k} & \dots & a_{1j} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & \mathbf{a}_{kk} & \dots & \mathbf{a}_{kj} & \dots & a_{kn} & \mathbf{b}_k \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & \mathbf{a}_{ik} & \dots & \mathbf{a}_{ij} & \dots & a_{in} & \mathbf{b}_i \\ & & & & & & & \\ & & & & & & & \\ & & a_{nk} & \dots & a_{nj} & \dots & a_{nn} & b_n \end{array} \right].$$

Θεωρούμε το υποσύστημα των εξισώσεων k έως n . Αν όλα τα στοιχεία $a_{kk}, \dots, a_{nk}$ μηδενίζονται, τότε προφανώς $|A| = 0$, οπότε σταματάμε (το σύστημα είναι τότε αόριστο ή αδύνατο). Αλλιώς, και εφόσον $a_{kk} \neq 0$, ανταλλάσσουμε τη γραμμή k του πίνακα $[A|b]$ με μια γραμμή i τέτοια ώστε $a_{ik} \neq 0$. Μετά, και για $i = k+1, \dots, n$, πολλαπλασιάζουμε τη γραμμή k του $[A|b]$ με τον πολλαπλασιαστή $p_i = a_{ik} / a_{kk}$ και την αφαιρούμε από τη γραμμή i . Απαλείφουμε έτσι το x_k από τις εξισώσεις $k+1$ έως n . Οι πράξεις αυτές γράφονται

$$\begin{aligned} p_i &= a_{ik} / a_{kk}, \quad i = k+1, \dots, n, \\ a_{ij} &= a_{ij} - p_i a_{kj}, \quad i = k+1, \dots, n, \quad j = k, \dots, n, \\ b_i &= b_i - p_i b_k, \quad i = k+1, \dots, n. \end{aligned}$$

Στο τέλος των παραπάνω πράξεων καταλήγουμε σε ένα γραμμικό σύστημα με **άνω-τριγωνικό** πίνακα. Αν $a_{nn} = 0$, σταματάμε ($|A| = 0$).

ΠΙΣΩ-ΑΝΤΙΚΑΤΑΣΤΑΣΗ. Ξεκινώντας από το $x_n = b_n / a_{nn}$ και έχοντας υπολογίσει τα $x_{n-1}, \dots, x_{k+1}$, υπολογίζουμε το x_k από την εξίσωση k

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}} (b_k - \sum_{j=k+1}^n a_{kj} x_j), \quad k = n-1, \dots, 1.$$

Για λόγους αριθμητικής ακρίβειας, σε κάθε βήμα k της τριγωνοποίησης, και πριν απαλείψουμε το x_k , ανταλλάσσουμε τη γραμμή k του πίνακα $[A|b]$ με την γραμμή i , $i > k$, που έχει το μεγαλύτερο συντελεστή a_{ik} σε απόλυτη τιμή. Η πράξη αυτή καλείται **μερική οδήγηση κατά στήλη** (pivoting) και το επιλεγμένο στοιχείο a_{ik} **οδηγό στοιχείο**. Αν εφαρμόσουμε τη μέθοδο Gauss χωρίς οδήγηση, λόγω

σφαλμάτων του Υπολογιστή (ο οποίος χρησιμοποιεί αριθμητική κινητής υποδιαστολής με ένα πεπερασμένο αριθμό σημαντικών ψηφίων και στρογγύλευση) η αριθμητική λύση μπορεί να διαφέρει κατά πολύ από την ακριβή λύση.

Παράδειγμα 1. Έστω το γραμμικό σύστημα με επανξιμένο πίνακα

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 3 & | & -1 \\ 2 & 1 & 1 & | & 3 \\ 1 & 0 & 2 & | & -1 \end{bmatrix}$$

Ανταλλάσσουμε την πρώτη γραμμή με τη δεύτερη

$$\begin{matrix} p_2 = 0 \\ p_3 = 1/2 \end{matrix} \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & | & 3 \\ 0 & 1 & 3 & | & -1 \\ 1 & 0 & 2 & | & -1 \end{bmatrix}$$

Πολλαπλασιάζουμε την πρώτη γραμμή με $1/2$ και την αφαιρούμε από την τρίτη

$$p_3 = -1/2 \begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & | & 3 \\ 0 & 1 & 3 & | & -1 \\ 0 & -1/2 & 3/2 & | & -5/2 \end{bmatrix}$$

Πολλαπλασιάζουμε τη δεύτερη γραμμή με $-1/2$ και την αφαιρούμε από την τρίτη

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & 1 & | & 3 \\ 0 & 1 & 3 & | & -1 \\ 0 & 0 & 3 & | & -3 \end{bmatrix}$$

Υπολογίζουμε τώρα το x_3 από την τρίτη εξίσωση

$$x_3 = -3/3 = -1,$$

αντικαθιστούμε στη δεύτερη για να υπολογίσουμε το x_2

$$x_2 = -1 - 3x_3 = 2,$$

και μετά στην πρώτη για το x_1

$$x_1 = (3 - x_2 - x_3)/2 = 1.$$

Παράδειγμα 2 (Επίδραση της οδήγησης). Έστω το σύστημα

$$\begin{bmatrix} 0.0003 & 1.566 & | & 1.569 \\ 0.3454 & -2.436 & | & 1.018 \end{bmatrix}.$$

Η ακριβής λύση είναι $x_1 = 10$ και $x_2 = 1$. Εφαρμόζουμε πρώτα τη μέθοδο Gauss *χωρίς οδήγηση*, εκτελώντας όλες τις ενδιάμεσες πράξεις με αριθμητική κινητής υποδιαστολής με 4 σημαντικά ψηφία (σ.ψ.) και στρογγύλευση. Πολλαπλασιάζουμε την πρώτη εξίσωση με

$$p_2 = \frac{0.3454}{0.0003} = 1151.3333 \approx 1151,$$

την αφαιρούμε από τη δεύτερη

$$-1804x_2 = -1805,$$

και βρίσκουμε

$$x_2 = \frac{1805}{1804} = 1.0005543 \approx 1.001, \quad x_1 = 3.333.$$

Ας εφαρμόσουμε τώρα τη μέθοδο με *οδήγηση*. Έχουμε

$$p_2 = \frac{0.0003}{0.3454} \approx 0.0008686,$$

οπότε η δεύτερη εξίσωση γίνεται

$$1.568x_2 = 1.568,$$

και άρα

$$x_2 = 1.000, \quad x_1 = 10.00.$$

Η ανακρίβεια της πρώτης λύσης οφείλεται στο ότι το a_{11} είναι μικρό σχετικά με το a_{21} , με αποτέλεσμα ο πολλαπλασιαστής p_2 να είναι εδώ μεγάλος (και με μεγάλο σφάλμα στρογγύλευσης στα 4 σ.ψ.) σχετικά με τα στοιχεία της δεύτερης εξίσωσης. Κατόπιν προσθέτουμε σχετικά μεγάλους αριθμούς στη δεύτερη εξίσωση και πάλι στρογγυλεύουμε στα 4 σ.ψ., αλλοιώνοντας έτσι σημαντικά τις πληροφορίες της δεύτερης εξίσωσης.

Αλγόριθμος 1.

Διαβάζουμε τα n, A, b

ΤΡΙΓΩΝΟΠΟΙΗΣΗ

Για $k = 1, \dots, n-1$ εκτελούμε μέχρι το 1

Βρίσκουμε ένα δείκτη m τέτοιο ώστε $|a_{mk}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$

Αν $a_{mk} = 0$, σταματάμε ($|A| = 0$)

Αν $m \neq k$, ανταλλάσσουμε τις γραμμές k και m του πίνακα $[A|b]$

Για $i = k+1, \dots, n$ εκτελούμε μέχρι το 1

$$p = a_{ik} / a_{kk}$$

Για $j = k+1, \dots, n$ εκτελούμε μέχρι το 2

$$2 \quad a_{ij} = a_{ij} - pa_{kj}$$

$$1 \quad b_i = b_i - pb_k$$

Αν $a_{nn} = 0$, σταματάμε ($|A| = 0$)

ΠΙΣΩ-ΑΝΤΙΚΑΤΑΣΤΑΣΗ

$$x_n = b_n / a_{nn}$$

Για $k = n-1, \dots, 1$ εκτελούμε μέχρι το 3

$$3 \quad x_k = (b_k - \sum_{j=k+1}^n a_{kj} x_j) / a_{kk}$$

Εκτυπώνουμε το x

Σταματάμε

Στις εφαρμογές (π.χ. κατά την επίλυση χρονικά μεταβαλλόμενων προβλημάτων συνοριακών τιμών), έχουμε συχνά να λύσουμε ≥ 2 γραμμικά συστήματα με κοινό πίνακα A . Για το σκοπό αυτό, ο παρακάτω τροποποιημένος αλγόριθμος της μεθόδου Gauss εκτελεί πρώτα τις πράξεις της τριγωνοποίησης που αφορούν τον πίνακα A , αποθηκεύοντας τους πολλαπλασιαστές $p_i^{(k)}$, $i = k+1, \dots, n$, για $k = 1, \dots, n-1$, κατά στήλες στο κάτω-τριγωνικό μέρος του πίνακα A , καθώς και τους δείκτες $m(k)$, $k = 1, \dots, n-1$, των επιλεγμένων οδηγών στοιχείων a_{mk} σε ένα ακέραιο διάνυσμα l , μετά εκτελεί τις πράξεις που αφορούν το διάνυσμα b , και τέλος εκτελεί την πίσω-αντικατάσταση κανονικά. Με τον τρόπο αυτό εξοικονομούμε πράξεις, αφού αρκεί να

τριγωνοποιήσουμε τον πίνακα A μια φορά μόνο και να εκτελούμε μετά για κάθε διάνυσμα b τις αντίστοιχες πράξεις απαλοιφής και την πίσω-αντικατάσταση.

Αλγόριθμος 2. (Με αποθήκευση των πολλαπλασιαστών)

Διαβάζουμε τα n, A, b

ΤΡΙΓΩΝΟΠΟΙΗΣΗ ΤΟΥ ΠΙΝΑΚΑ A

Για $k = 1, \dots, n-1$ εκτελούμε μέχρι το 1

Βρίσκουμε ένα δείκτη m τέτοιο ώστε $|a_{mk}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}|$

Αν $a_{mk} = 0$, σταματάμε ($|A| = 0$)

$l_k = m$

Αν $m \neq k$, ανταλλάσσουμε τις γραμμές k και m του πίνακα A

Για $i = k+1, \dots, n$ εκτελούμε μέχρι το 1

$a_{ik} = a_{ik} / a_{kk}$

Για $j = k+1, \dots, n$ εκτελούμε μέχρι το 1

1 $a_{ij} = a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$

Αν $a_{nn} = 0$, σταματάμε ($|A| = 0$)

ΠΡΑΞΕΙΣ ΠΑΝΩ ΣΤΟ ΔΙΑΝΥΣΜΑ b

Για $k = 1, \dots, n-1$ εκτελούμε μέχρι το 2

$m = l_k$

Αν $m \neq k$, ανταλλάσσουμε τα δεύτερα μέλη b_k και b_m

Για $i = k+1, \dots, n$ εκτελούμε μέχρι το 2

2 $b_i = b_i - a_{ik} b_k$

ΠΙΣΩ-ΑΝΤΙΚΑΤΑΣΤΑΣΗ

$x_n = b_n / a_{nn}$

Για $k = n-1, \dots, 1$ εκτελούμε μέχρι το 3

3 $x_k = (b_k - \sum_{j=k+1}^n a_{kj} x_j) / a_{kk}$

Εκτυπώνουμε το x

Σταματάμε

Υπολογισμός αντίστροφου και ορίζουσας ενός πίνακα.

Δύο ενδιαφέρουσες εφαρμογές της μεθόδου απαλοιφής Gauss είναι ο υπολογισμός του αντίστροφου και της ορίζουσας ενός $n \times n$ πίνακα A . Ο αντίστροφος είναι ένας (άγνωστος) πίνακας $X = A^{-1}$ τέτοιος ώστε

$$AX = I,$$

όπου I ο μοναδιαίος $n \times n$ πίνακας. Η εξίσωση πινάκων αυτή ισοδυναμεί με την επίλυση των n γραμμικών συστημάτων με κοινό πίνακα A

$$A\bar{x}_j = e_j, \quad j = 1, \dots, n,$$

όπου $\bar{x}_j$ η στήλη j του πίνακα X και e_j το j -οστό διάνυσμα της κανονικής βάσης του $\mathbf{R}^n$, τα οποία μπορούν να λυθούν με τον Αλγόριθμο 2, εκτελώντας μια φορά μόνο την τριγωνοποίηση του πίνακα A .

Για να υπολογίσουμε την ορίζουσα του A , εφαρμόζουμε την τριγωνοποίηση της μεθόδου Gauss πάνω στον πίνακα A μόνο (1ο μέρος του Αλγορίθμου 1 ή 2), οπότε η ορίζουσα του A είναι

$$|A| = (-1)^s \prod_{i=1}^n a'_{ii},$$

όπου a'_{ii} τα διαγώνια στοιχεία του τελικού τριγωνοποιημένου πίνακα και s ο αριθμός των ανταλλαγών που έχουν γίνει κατά τη διάρκεια της τριγωνοποίησης.

Συστήματα $m \times n$

Έστω ένα γραμμικό σύστημα $m \times n$, ή $n \times n$ με $|A| = 0$. Εφαρμόζουμε εδώ τη μέθοδο απαλοιφής Gauss με μερική οδήγηση **κατά γραμμή** (δηλ. με ανταλλαγές αγνώστων αντί γραμμών). Κατά τη διάρκεια της τριγωνοποίησης, κάθε φορά που συναντάμε μια εξίσωση k της μορφής

$$0 = b_k, \text{ με } b_k = 0,$$

την παραλείπουμε. Αν συναντήσουμε μια εξίσωση της μορφής

$$0 = b_k, \text{ με } b_k \neq 0,$$

τότε το σύστημα είναι προφανώς **αδύνατο** και σταματάμε. Αλλιώς, εφαρμόζουμε την απαλοιφή Gauss (συνήθως με μερική οδήγηση κατά στήλη, για λόγους ακρίβειας) και καταλήγουμε σε ένα σύστημα της μορφής

$$a_{11}x_{j_1} + a_{12}x_{j_2} + \dots + a_{1r}x_{j_r} + \dots + a_{1n}x_{j_n} = b_1$$

$$\dots \dots \dots$$

$$a_{rr}x_{j_r} + \dots + a_{rn}x_{j_n} = b_r$$

$$0 = 0$$

$$\dots \dots m-r$$

$$0 = 0$$

με $r \leq n$, $r \leq m$. Αν $r = n$, λύνουμε μονοσήμαντα το σύστημα με πίσω-αντικατάσταση. Αν $r < n$, δίνουμε αυθαίρετες τιμές στις “αυθαίρετες” αγνώστους $x_{j_{r+1}}$ έως x_{j_n} και λύνουμε το σύστημα ως προς τις υπόλοιπες αγνώστους με πίσω-αντικατάσταση. Το σύστημα είναι τότε **αόριστο**. Για την πρακτική επίλυση, δίνουμε διαδοχικά στις $n-r$ αυθαίρετες αγνώστους τις τιμές

$$(1, 0, \dots, 0), (0, 1, 0, \dots, 0), \dots, (0, \dots, 1),$$

για να υπολογίσουμε μια **βάση** του χώρου των λύσεων του **ομογενούς** συστήματος $Ax = 0$, και μετά δίνουμε μηδενικές τιμές στις αγνώστους αυτές για να υπολογίσουμε μια ειδική λύση του **μη ομογενούς** συστήματος $Ax = b$. Η γενική λύση του συστήματος $Ax = b$ δίνεται τότε από το άθροισμα της ειδικής λύσης του μη ομογενούς συστήματος συν ένα γραμμικό συνδυασμό των διανυσμάτων της παραπάνω βάσης λύσεων του ομογενούς συστήματος.