NATIONAL TECHNICAL UNIVERSITY OF ATHENS

School of Mechanical Engineering

Fluids Section - Lab. Of Thermal Turbomachines

Parallel CFD & Optimization Unit (PCOpt/NTUA)

Αριθμητική Επίλυση Συστημάτων Γραμμικών Εξισώσεων

Κυριάκος Χ. ΓΙΑΝΝΑΚΟΓΛΟΥ, Καθηγητής ΕΜΠ
kgianna@mail.ntua.gr
http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/kgianna
http://velos0.ltt.mech.ntua.gr/research

Τρόποι επίλυσης

- **Μέθοδοι Άμεσης Επίλυσης του Ax=b**
- **Μέθοδοι Επαναληπτικής Επίλυσης του Ax=b**

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

Μια αξιοσημείωτη κατηγορία μεθόδων:

- **Μέθοδοι Παραγοντοποίησης (Factorization Methods)**
- **Μέθοδοι Προσεγγιστικής Παραγοντοποίησης (Approximate Factorization Methods)**

A=LU ή A=LDU

Μέθοδοι για Ειδικής μορφής Μητρώα:

- **Αλγόριθμος Thomas για Τριδιαγώνια Μητρώα**

Απαλοιφή κατά Gauss (Gauss Elimination)

Μέθοδος Άμεσης Επίλυσης του Ax=b

Ο Μηχανικός χρησιμοποιεί τις μεθόδους άμεσης επίλυσης μόνο για πολύ μικρά συστήματα. Είναι αργές και, συχνά, δεν διαθέτει αποθηκευμένο το τετραγωνικό μητρώο αλλά δημιουργεί κάθε γραμμή του όταν την χρειάζεται.

$$\begin{aligned} 2x_1 - 7x_2 + 4x_3 &= 9 \\ x_1 + 9x_2 - 6x_3 &= 1 \\ -3x_1 + 8x_2 + 5x_3 &= 6 \end{aligned}$$

ή

$$\begin{bmatrix} 2 & -7 & 4 \\ 1 & 9 & -6 \\ -3 & 8 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 6 \end{bmatrix}$$

$$A\vec{x} = \vec{b}$$

Απαλοιφή κατά Gauss (Gauss Elimination)

$$
\begin{aligned}
2x_1 - 7x_2 + 4x_3 &= 9 \\
x_1 + 9x_2 - 6x_3 &= 1 \\
-3x_1 + 8x_2 + 5x_3 &= 6
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
2x_1 - 7x_2 + 4x_3 &= 9 \\
\frac{25}{2}x_2 - 8x_3 &= -\frac{7}{2} \\
-\frac{5}{2}x_2 + 11x_3 &= \frac{39}{2}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
2x_1 - 7x_2 + 4x_3 &= 9 \\
\frac{25}{2}x_2 - 8x_3 &= -\frac{7}{2} \\
\frac{47}{5}x_3 &= \frac{188}{10}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
x_1 &= 1 \\
x_2 &= 1 \\
x_3 &= 2
\end{aligned}
$$

Απαλοιφή κατά Gauss (Gauss Elimination)

- **Οδηγεί πάντα σε λύση αν** $\det(A) \neq 0$
- **Διαρκής χρήση του ίδιου μητρώου αποθήκευσης**
- **Προφανώς, το αρχικό μητρώο «καταστρέφεται»**
- **Αριθμός πράξεων** $\propto \frac{n^3}{3}$ **(τι χρεώνουμε;)**
- **Πρακτικά ανεφάρμοστο σε μεγάλα μητρώα και μεγάλης κλίμακας μηχανολογικές εφαρμογές.**

Απαλοιφή κατά Gauss – Μέτρημα Πράξεων για πρόβλημα (nxn)

Αριστερό Μέλος:

$$\begin{bmatrix} X & X & X \\ X & X & X \\ X & X & X \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} X & X & X \\ 0 & Y & Y \\ 0 & Y & Y \end{bmatrix}$$

(n-1) πολλαπλασιαστές
$(n-1)^2$ πράξεις για νέα στοιχεία

Γίνεται (n-1) φορές:

Πλήθος πράξεων ανάλογο του κύβου του πλήθους των εξισώσεων

$$\text{ΠΡΑΞΕΙΣ}_1 = \sum_{i=1}^{n-1} \left[(n-i)^2 + (n-1) \right] = \frac{n^3 - n}{3}$$

Απαλοιφή κατά Gauss – Μέτρημα Πράξεων για πρόβλημα (nxn)

Δεξιό Μέλος:

$$\begin{bmatrix} \mathrm{A} \\ \mathrm{B} \\ \Gamma \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathrm{A} \\ \mathrm{E} \\ \mathrm{Z} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \mathrm{A} \\ \mathrm{E} \\ \mathrm{H} \end{bmatrix}$$

Γίνεται (n-1) φορές:

Πλήθος πράξεων ανάλογο του τετραγώνου του πλήθους των εξισώσεων

$$\Pi\mathrm{PA}\Xi\mathrm{EI}\Sigma_2 = (n-1) + (n-2) + \ldots + 1 = \frac{n(n-1)}{2}$$

Απαλοιφή κατά Gauss – Μέτρημα Πράξεων για πρόβλημα (nxn)

Συνολικά:

$$\text{ΠΡΑΞΕΙΣ} = \text{ΠΡΑΞΕΙΣ}_1 + \text{ΠΡΑΞΕΙΣ}_2 =$$
$$= \frac{n^3 - n}{3} + \frac{n(n-1)}{2} \propto \frac{n^3}{3}$$

Συνολικό πλήθος πράξεων ανάλογο του κύβου του πλήθους των εξισώσεων

Πολύ ακριβή μέθοδος για μεγάλα n !!!

Απαλοιφή κατά Gauss με Οδήγηση (Pivoting)

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & 2 & -2 \\ 3 & -1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 0 \\ 7 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -6 \\ 0 & -4 & -4 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ -18 \\ -20 \end{bmatrix}$$

<u>**Λύση:**</u> **Αναδιάταξη Γραμμών**

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & -4 & -4 \\ 0 & 0 & -6 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ -20 \\ -18 \end{bmatrix}$$

Απαλοιφή κατά Gauss με Οδήγηση (Pivoting)

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 \\ 2 & -2 & 1 \\ 5 & 3 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 6 \\ 4 \end{bmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{bmatrix} 5 & 3 & 1 \\ 2 & -2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 6 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 5 & 3 & 1 \\ 0 & -16/5 & 3/5 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 22/5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Pivoting με το max(|...|) στοιχείο κάθε στήλης

Απαλοιφή κατά Gauss με Οδήγηση (Pivoting)

$$\begin{bmatrix} 5 & 3 & 1 \\ 0 & -16/5 & 3/5 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 22/5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

Pivoting με το max(|...|) στοιχείο κάθε στήλης

$$\begin{bmatrix} 5 & 3 & 1 \\ 0 & -16/5 & 3/5 \\ 0 & 0 & 35/16 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 22/5 \\ 70/\ 16 \end{bmatrix}$$

$$x_1 = 2$$
$$x_2 = -1$$
$$x_3 = 2$$

Μέθοδος Gauss-Jordan (Εύρεση και του Αντίστροφου Μητρώου)

$$\begin{bmatrix} 2 & -7 & 4 \\ 1 & 9 & -6 \\ -3 & 8 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 9 \\ 1 \\ 6 \end{bmatrix}$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c|ccc} 2 & -7 & 4 & 9 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 9 & -6 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 8 & 5 & 6 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right]$$

$$\left[\begin{array}{ccc|c|ccc} 1 & -7/2 & 2 & 9/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 9 & -6 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ -3 & 8 & 5 & 6 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right]$$

Κανονικοποιείται στη μονάδα

$$\left[\begin{array}{ccc|c|ccc} 1 & -7/2 & 2 & 9/2 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 25/2 & -8 & -7/2 & -1/2 & 1 & 0 \\ 0 & -5/2 & 11 & 39/2 & 3/2 & 0 & 1 \end{array}\right]$$

Μέθοδος Gauss-Jordan (Εύρεση και του Αντίστροφου Μητρώου)

$$\left[\begin{array}{ccc|c|ccc} 1 & 0 & -6/25 & 88/25 & 9/25 & 7/25 & 0 \\ 0 & 1 & -16/25 & -7/25 & -1/25 & 2/25 & 0 \\ 0 & 0 & 47/5 & 94/5 & 7/5 & 1/5 & 1 \end{array}\right]$$

Στοιχείο Οδήγησης – Pivot Element

$$\left[\begin{array}{ccc|c|ccc} 1 & 0 & 0 & 4 & 92/235 & 67/235 & 6/235 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 13/235 & 22/235 & 16/235 \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 7/47 & 1/47 & 5/47 \end{array}\right]$$

Λύση **Αντίστροφος**

Κανονικοποίηση (Scaling), έστω σε ΗΥ που κρατά 4 ΣΨ

$$\begin{aligned} 0.0003x_1 + 3.0000x_2 &= 2.0001 \\ 1.0000x_1 + 1.0000x_2 &= 1.0000 \end{aligned}$$

Ακριβής Λύση (1/3,2/3)

(Α) Διαιρώ με το διαγώνιο (κάθε διαγώνιος →1)

$$\begin{aligned} x_1 + 10000x_2 &= 6667 \\ x_1 + x_2 &= 1 \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} x_1 + 10000x_2 &= 6667 \\ 0x_1 - 9999x_2 &= -6666 \end{aligned}$$

$$x_2 = \frac{6666}{9999} = 0.6667 \quad (= \frac{2}{3})$$

$$x_1 = 6667 - 10000 \cdot \frac{6666}{9999} = 6667 - 6667 = 0$$

?

Κανονικοποίηση (Scaling), έστω σε ΗΥ που κρατά 4 ΣΨ

$$0.0003x_1 + 3.0000x_2 = 2.0001$$
$$1.0000x_1 + 1.0000x_2 = 1.0000$$

Ακριβής Λύση (1/3,2/3)

(**B) Pivoting με το Μεγαλύτερο Στοιχείο (αλλαγή σειράς πράξεων)**

$$x_1 + x_2 = 1$$
$$x_1 + 10000x_2 = 6667$$

$$x_1 + x_2 = 1$$
$$0x_1 + 9999x_2 = 6666$$

$$x_2 = \frac{6666}{9999} = 0.6667 \quad (= \frac{2}{3})$$

$$x_1 = 1 - x_2 = 1.000 - 0.6667 = 0.3333 \quad (= 1/3)$$

Κατάσταση Γραμμικών Συστημάτων

$$\begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0.780 & 0.563 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.254 \\ 0.217 \end{bmatrix}$$

Ακριβής Λύση (1,-1)

$$\begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0 & 0.001 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.254 \\ 0.001 \end{bmatrix}$$

Υπόθεση εργασίας: ο ΗΥ κρατά 3 ΣΨ (ο δικός σας ΗΥ δεν κρατά μόνο 3 ΣΨ αλλά αναλογικά ισχύουν τα συμπεράσματα!

$$x_2 = 1 \quad , \quad x_1 = -0.443$$

?

Τι φταίει????

Κατάσταση Γραμμικών Συστημάτων

$$\begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0.780 & 0.563 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.254 \\ 0.217 \end{bmatrix}$$

Ακριβής Λύση (1,-1)

$$\begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0.780 & 0.563 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.253 \\ 0.218 \end{bmatrix}$$

Ακριβής Λύση (1223,-1694)

Μια μικρή αλλαγή στις τιμές του <u>δεξιού</u> μέλους προκαλεί τεράστια αλλαγή στη λύση!!!!

Σύστημα/Μητρώο Κακής Κατάστασης (Ill-Conditioned Matrix)

Κατάσταση Γραμμικών Συστημάτων

$$\begin{bmatrix} 0.913 & 0.659 \\ 0.780 & 0.563 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.254 \\ 0.217 \end{bmatrix}$$

Παρατηρήστε ότι det(A)=10^{-6}

Μήπως αυτή είναι η αιτία????

?

Αριθμοί Κατάστασης (Condition Numbers) Γραμμικών Συστημάτων

Αριθμός Κατάστασης του Hadamard

$$K_H(A) = \frac{|\det(A)|}{r_1 r_2 \ldots r_n}$$

$$r_i = \sqrt{\sum_{k=1}^{n} a_{ik}^2}$$

(Άθροισμα τετραγώνων στοιχείων γραμμής)

Το μητρώο Α είναι σε κακή κατάσταση (ill-conditioned) αν $K_H(A) \ll 1$

Εδώ: $K_H(A) \sim 10^{-6}$

Αριθμοί Κατάστασης (Condition Numbers) Γραμμικών Συστημάτων

Αριθμός Κατάστασης

$$\mathrm{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$$

Το μητρώο Α είναι σε κακή κατάσταση (ill-conditioned) αν cond(A)>>

Σχόλιο: Υπολογίζω τον αντίστροφο!!!! Κόστος????

Αριθμοί Κατάστασης (Condition Numbers) Γραμμικών Συστημάτων

Φασματικός Αριθμός Κατάστασης (Spectral Condition Number)

$$\mu(A) = \frac{\max|\lambda_i|}{\min|\lambda_i|}$$

Το μητρώο A είναι σε κακή κατάσταση (ill-conditioned) αν μ(A)>>

Εδώ: $\mu(A) \sim 2.1 \times 10^6$

Σχόλιο: Επιλύω το ιδιοπρόβλημα (=βρίσκω ιδιοτιμές & ιδιοδιανύσματα) !!!! Κόστος????

Επαναληπτικές Μέθοδοι Επίλυσης του Ax=b

$$
\begin{aligned}
&a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \ldots + a_{1,n-1}x_{n-1} + a_{1,n}x_n = b_1 \\
&a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \ldots + a_{2,n-1}x_{n-1} + a_{2,n}x_n = b_2 \\
&\ldots \\
&a_{n,1}x_1 + a_{n,2}x_2 + \ldots + a_{n,n-1}x_{n-1} + a_{n,n}x_n = b_n
\end{aligned}
$$

Η i-ιοστή εξίσωση του συστήματος:

$$
a_{i,1}x_1 + a_{i,2}x_2 + \ldots + a_{i,n-1}x_{n-1} + a_{i,n}x_n = b_i
$$

Επαναληπτικές Μέθοδοι Επίλυσης του Ax=b

$$x_i = \frac{1}{a_{i,i}}\left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{i,k}x_k - \sum_{k=i+1}^{n} a_{i,k}x_k\right]$$

Μέθοδος Jacobi:

$$x_i^{new} = \frac{1}{a_{i,i}}\left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{i,k}x_k^{old} - \sum_{k=i+1}^{n} a_{i,k}x_k^{old}\right]$$

Μέθοδος Gauss-Seidel:

$$x_i^{new} = \frac{1}{a_{i,i}}\left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{i,k}x_k^{new} - \sum_{k=i+1}^{n} a_{i,k}x_k^{old}\right]$$

Σχόλια για την ταχύτητα & την παραλληλοποίησή τους.

Χρήση Χαλάρωσης (Relaxation)

$$x_i^* = \frac{1}{a_{i,i}} \left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{i,k} x_k - \sum_{k=i+1}^{n} a_{i,k} x_k \right]$$

$$x_i^{new} = \omega x_i^* + (1-\omega) x_i^{old}$$

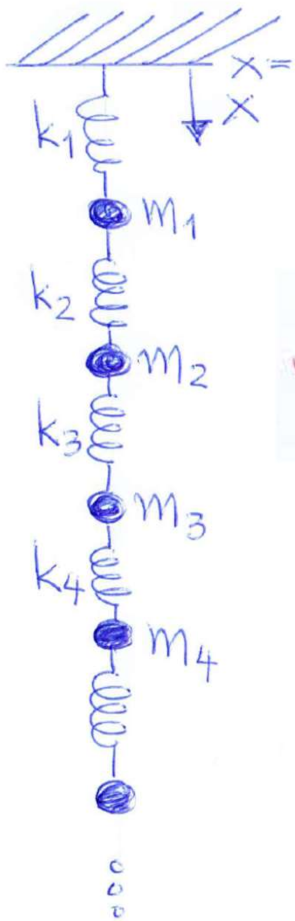
Υπο-χαλάρωση (Under-relaxation)
Υπερ-χαλάρωση (Over-relaxation)
Πότε και γιατί;;;;

Τριδιαγώνια Μητρώα - Αλγόριθμος Thomas

$$A=\begin{bmatrix} d_1 & a_1 & & & & \\ b_2 & d_2 & a_2 & & \emptyset & \\ & b_3 & d_3 & a_3 & & \\ & & b_4 & d_4 & a_4 & \\ & \emptyset & & b_5 & d_5 & a_6 \\ & & & & & \ddots \end{bmatrix}$$

Μια εμπρός αντικατάσταση (front substitution) → απαλοιφή των b_i
Μια πίσω αντικατάσταση (back substitution) → απαλοιφή των (νέων) a_i
Αλλάζουν και τα δεξιά μέλη

Τριδιαγώνια Μητρώα - Αλγόριθμος Thomas - Παράδειγμα



$$k_i (x_i - x_{i-1} - L_i) = k_{i+1}(x_{i+1} - x_i - L_{i+1}) + m_i g$$

$$\underbrace{-k_i}_{b_i} x_{i-1} + \underbrace{(k_i + k_{i+1})}_{d_i} x_i \underbrace{- k_{i+1}}_{a_i} x_{i+1} = \underbrace{m_i g + k_i L_i - k_{i+1} L_{i+1}}_{RHS_i}$$

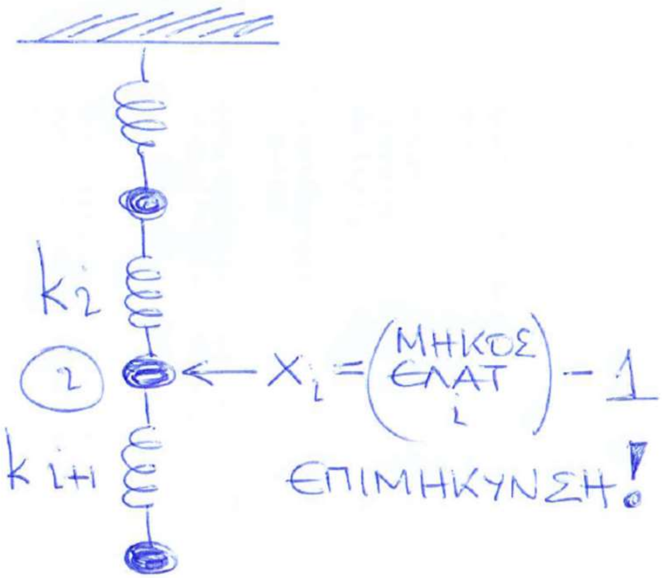
<u>αν κοινά k & L:</u>

$$-k x_{i-1} + 2k x_i - k x_{i+1} = m_i g$$

$$b_i x_{i-1} + d_i x_i + a_i x_{i+1} = RHS_i$$

→ **Τριδιαγώνιο Σύστημα Εξισώσεων**

Τριδιαγώνια Μητρώα - Αλγόριθμος Thomas - Παράδειγμα

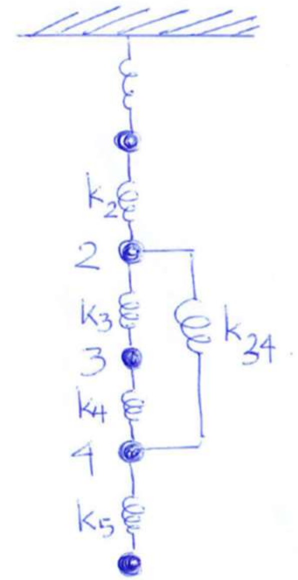


$$k_i x_i = k_{i+1} x_{i+1} + m_i g$$

$$\underbrace{k_i}_{d_i} x_i - \underbrace{k_{i+1}}_{a_i} x_{i+1} = \underbrace{m_i g}_{RHS_i}$$

→ **Διδιαγώνιο Σύστημα Εξισώσεων**
(αν διαφορετικός ορισμός x_i)

Παράδειγμα σε παραλλαγή

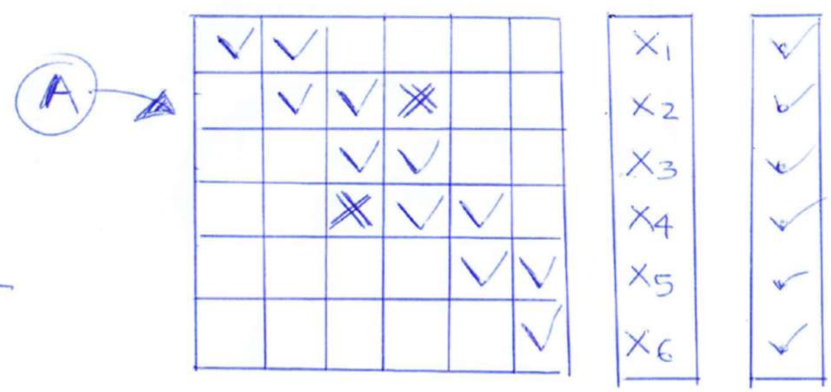


- εξίσωση του (2):

$$k_2 x_2 = k_3 x_3 + k_{34}(x_3 + x_4) + m_2 g$$

- εξίσωση του (4)

$$k_4 x_4 = k_5 x_5 - k_{34}(x_3 + x_4) + m_4 g$$



x_i = ΕΠΙΜΗΚΥΝΣΕΙΣ

Δέλτα Διατύπωση - Delta Formulation

$$A\vec{x} = \vec{b}$$
$$\vec{x}^{n} \rightarrow \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \Delta\vec{x}$$
$$A(\vec{x}^{n} + \Delta\vec{x}) = \vec{b}$$
$$A\Delta\vec{x} = \vec{b} - A\vec{x}^{n}$$

Numerics **Physics (RHS)**

$$A'\Delta\vec{x} = b - A\vec{x}^{n}$$
$$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \Delta\vec{x}$$

Το A’ αποφασίζεται από μας ως μια <u>εύκολα αντιστρέψιμη</u> παραλλαγή του μητρώου A.

Δέλτα Διατύπωση - Delta Formulation (για Μη-Γραμμικό Σύστημα)

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{0}$$

$$\vec{x}^{\,n} \rightarrow \vec{x}^{\,n+1} = \vec{x}^{\,n} + \Delta\vec{x}$$

$$\vec{F}(\vec{x}^{\,n+1}) = \vec{0}$$

$$\vec{F}(\vec{x}^{\,n}) + \underbrace{\left.\frac{\partial \vec{F}}{\partial \vec{x}}\right|^{n}}_{A^n} \Delta\vec{x} = \vec{0}$$

$$A^n \Delta\vec{x} = -\vec{F}(\vec{x}^{\,n}).$$

$$\vec{x}^{\,n+1} = \vec{x}^{\,n} + \Delta\vec{x}$$

Η ίδια ακριβώς ιδέα για μη-γραμμικά συστήματα.
A=Ιακωβιανή (ή μια προσέγγισή της)

Παραγοντοποίηση - Factorization

- **Μέθοδοι Παραγοντοποίησης (Factorization Methods)**
- **Μέθοδοι Προσεγγιστικής Παραγοντοποίησης (Approximate Factorization Methods)**

A=LU ή A=LDU

L = άνω τριγωνικό μητρώο
U = κάτω τριγωνικό μητρώο
D = διαγώνιο μητρώο

$$A\vec{x}=\vec{b} \rightarrow LU\vec{x}=\vec{b}$$

1. $L\vec{Y}=\vec{b}$
2. $U\vec{x}=\vec{Y}$

Παραγοντοποίηση - Factorization

$$A = LU$$

$$A = \begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \dots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \dots & a_{2,N} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \dots & a_{3,N} \\ & & & \vdots & \\ a_{N,1} & a_{N,2} & a_{N,3} & \dots & a_{N,N} \end{vmatrix}$$

Crout → $u_{i,i} = 1$

Doolittle → $l_{i,i} = 1$

$$L = \begin{vmatrix} l_{1,1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & 0 & \dots & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & l_{3,3} & \dots & 0 \\ & & & \vdots & \\ l_{N,1} & l_{N,2} & l_{N,3} & \dots & l_{N,N} \end{vmatrix} \qquad U = \begin{vmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \dots & u_{1,N} \\ 0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \dots & u_{2,N} \\ 0 & 0 & u_{3,3} & \dots & u_{3,N} \\ & & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{N,N} \end{vmatrix}$$

Αλγόριθμος Doolittle

- Για $j = 1, 2, \ldots, N$ υπολόγισε:

$$u_{1,j} \;=\; a_{1,j}$$

- Για $i = 2, 3, \ldots, N$ υπολόγισε:

$$l_{i,1} \;=\; \frac{a_{i,1}}{u_{1,1}}$$

- Σε εξωτερικό βρόχο για τις τιμές $r = 2, 3, \ldots, N$ εκτέλεσε, τον ένα μετά τον άλλο τους εξής δύο εσωτερικούς βρόχους:
  - Για $j = r, r+1, \ldots, N$ υπολόγισε:

$$u_{r,j} \;=\; a_{r,j} \;-\; \sum_{k=1}^{r-1} l_{r,k} u_{k,j}$$

  - Για $i = r+1, r+2, \ldots, N$ υπολόγισε:

$$l_{i,r} \;=\; \frac{a_{i,r} \;-\; \sum_{k=1}^{r-1} l_{i,k} u_{k,r}}{u_{r,r}}$$

Παραγοντοποίηση – Μέθοδος Crout

$$\begin{bmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ell_{11} & & & \\ \ell_{21} & \ell_{22} & & \\ \ell_{31} & \ell_{32} & \ell_{33} & \\ \ell_{41} & \ell_{42} & \ell_{43} & \ell_{44} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} \\ & 1 & u_{23} & u_{24} \\ & & 1 & u_{34} \\ & & & 1 \end{bmatrix}$$

$$A = LU$$

- $\ell_{i1} = \alpha_{i1} \qquad i = 1, 2, \ldots, N$
- $u_{1j} = \dfrac{\alpha_{1j}}{\ell_{11}} \qquad j = 2, \ldots, N$
- $\ell_{ir} = \alpha_{ir} - \sum_{k=1}^{r-1} \ell_{ik} u_{kr} \qquad i = r, \ldots, N$
- $u_{rj} = \dfrac{1}{\ell_{rr}} \left\{ \alpha_{rj} - \sum_{k=1}^{r-1} \ell_{rk} u_{kj} \right\} \qquad j = r+1, \ldots, N$

εξωτερικός βρόχος $r = 2, 3, \ldots, N$

Παραγοντοποίηση – Εναλλακτική Γραφή

A=LDU, όπου:

L = κάτω τριγωνικός με μοναδιαίο διαγώνιο στοιχείο

U = πάνω τριγωνικός με μοναδιαίο διαγώνιο στοιχείο

D = διαγώνιο μητρώο

Βήματα επίλυσης:

(1) $L\vec{Y} = \vec{b}$

(2) $D\vec{Z} = \vec{Y}$

(3) $U\vec{X} = \vec{Z}$

Μέθοδος Cholesky

Για Συμμετρικά Μητρώα:

$$A = L\,L^T$$

$$A = \begin{vmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \dots & a_{1,N} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \dots & a_{2,N} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \dots & a_{3,N} \\ & & & \vdots & \\ a_{N,1} & a_{N,2} & a_{N,3} & \dots & a_{N,N} \end{vmatrix} \qquad L = \begin{vmatrix} l_{1,1} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & 0 & \dots & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & l_{3,3} & \dots & 0 \\ & & & \vdots & \\ l_{N,1} & l_{N,2} & l_{N,3} & \dots & l_{N,N} \end{vmatrix}$$

Μέθοδος Cholesky

Για Συμμετρικά Μητρώα:

- Για $i = 1, 2, \ldots, N$ υπολόγισε το διαγώνιο στοιχείο του L για την αντίστοιχη γραμμή:

$$l_{i,i} = \sqrt{a_{i,i} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{i,m}^2}$$

  - Για κάθε τιμή του i, πραγματοποίησε τον εσωτερικό βρόχο, $k = i + 1, \ldots, N$, και υπολόγισε τα στοχεία της i–ιοστής στήλης του L, που προφανώς βρίσκονται κάτω από το διαγώνιο στοιχείο που υπολογίσθηκε προηγουμένως:

$$l_{k,i} = \frac{1}{l_{i,i}} \left[a_{k,i} - \sum_{m=1}^{i-1} l_{k,m} l_{i,m} \right]$$

Μέθοδος Cholesky

Υπενθύμιση: Ο αντίστροφος κάτω τριγωνικού μητρώου είναι και πάλι ένα κάτω τριγωνικό μητρώο.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & 0 \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ c_{21} & 1 & 0 & 0 \\ c_{31} & c_{32} & 1 & 0 \\ c_{41} & c_{42} & c_{43} & 1 \end{bmatrix} = I$$

Μέθοδος Cholesky – Αριθμητική Εφαρμογή

$A = LL^T$ $\lambda x.$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & \emptyset & \emptyset \\ l_{21} & l_{22} & \emptyset \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} \\ \emptyset & l_{22} & l_{32} \\ \emptyset & \emptyset & l_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1/2 & 1/3 \\ 1/2 & 1/3 & 1/4 \\ 1/3 & 1/4 & 1/5 \end{bmatrix}$$

$$l_{11} \cdot l_{11} = 1 \Rightarrow l_{11} = 1$$

$$l_{21} \cdot l_{11} = \frac{1}{2} \Rightarrow l_{21} = \frac{1}{2}$$

$$l_{21}^2 + l_{22}^2 = \frac{1}{3} \Rightarrow l_{22} = \frac{1}{\sqrt{12}}$$

$$l_{31} l_{11} = \frac{1}{3} \Rightarrow l_{31} = \frac{1}{3}$$

$$l_{31} l_{21} + l_{32} l_{22} = \frac{1}{4} \Rightarrow l_{32} = \frac{1}{\sqrt{12}}$$

$$l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 = \frac{1}{5} \Rightarrow l_{33} = \frac{1}{\sqrt{180}}$$

Προσεγγιστική Παραγοντοποίηση – Γιατί;;;

$$A \cong LU$$

$$A\vec{x} = \vec{b} \quad , \quad \vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \Delta\vec{x}$$

$$\underbrace{A}_{\text{NUMERICS}} \Delta\vec{x} = \vec{b} - A\vec{x}^{n} \Rightarrow \boxed{LU\Delta\vec{x} = \vec{b} - A\vec{x}^{n}}$$

Επαναληπτικός Αλγόριθμος

$n=1$; $\vec{x}^{1}$ = ΑΡΧΙΚΟΠΟΙΗΣΗ

$A \cong LU$ παραγοντοποίηση

$L\vec{y} = \vec{b} - A\vec{x}^{n}$

$U\Delta\vec{x} = \vec{y}$

$\vec{x}^{n+1} = \vec{x}^{n} + \Delta\vec{x}$

$n \rightarrow n+1$