Εισαγωγή

Η Αριθμητική Γραμμική Αλγεβρα ασχολείται με την αριθμητική επίλυση προβλημάτων Γραμμικής Άλγεβρας. Ο κύριος στόχος της είναι η ανάπτυξη κατάλληλων θεωρητικών μεθόδων που υλοποιούνται αριθμητικά και οδηγούν σε αλγόριθμους οι οποίοι εκτελούνται αποτελεσματικά στον υπολογιστή. Η βέλτιστη υλοποίηση των προτεινόμενων αλγορίθμων από πλευράς πολυπλοκότητας, ευστάθειας και οικονομίας στη μνήμη του υπολογιστή εμπίπτει στους Επιστημονικούς Υπολογισμούς. Η Αριθμητική Γραμμική Αλγεβρα και οι Επιστημονικοί Υπολογισμοί παίζουν πρωταρχικό ρόλο στη σύγχρονη εφαρμοσμένη και τεχνολογική έρευνα και εφοδιάζουν την επιστημονική κοινότητα με αξιόπιστο λογισμικό για ευρεία χρήση απο επιστήμονες και μηχανικούς. Στο παρόν βιβλίο, παρουσιάζεται μια εισαγωγή στα βασικά θέματα της Αριθμητικής Γραμμικής Αλγεβρας και των Επιστημονικών Υπολογισμών που προκύπτουν από αυτά.

Τα πιο σημαντικά προβλήματα με τα οποία ασχολείται η Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα είναι:

1. Το Πρόβλημα των Γραμμικών Συστημάτων

Να επιλυθεί αριθμητικά το σύστημα $Ax = b$, όπου A $n \times n$ πίνακας και b διάνυσμα διάστασης n.

Δεν είναι υπερβολή εάν αναφέρουμε ότι το πρόβλημα των γραμμικών συστημάτων εμφανίζεται σχεδόν σε όλους τους κλάδους των επιστημών και της τεχνολογίας, όπως, για παράδειγμα, τα εφαρμοσμένα μαθηματικά, η βιολογία, η χημεία και η φυσική. Η κύρια πηγή του προβλήματος αυτού είναι η αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων, συνήθων ή μερικών. Για την αριθμητική επίλυση ενός συστήματος διαφορικών εξισώσεων με τις μεθόδους των πεπερασμένων διαφορών ή των πεπερασμένων στοιχείων οδηγούμεθα στην επίλυση ενός γραμμικού συστήματος, η λύση του οποίου μας δίνει μια προσεγγιστική λύση των διαφορικών εξισώσεων.

Οι κλασικοί τρόποι επίλυσης του παραπάνω προβλήματος με τεχνικές Γραμμικής Άλγεβρας είναι ασύμφοροι υπολογιστικά και δεν ενδείκνυται η αριθμητική εφαρμογή τους. Συγκεκριμένα, για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος 20×20 με τον κανόνα του Cramer και τη χρήση του απλού ορισμού της ορίζουσας ενός πίνακα, ακόμα και στον πιο γρήγορο υπολογιστή, θα χρειαζόταν περισσότερο από ένα εκατομμύριο χρόνια. Επίσης, ο υπολογισμός της μοναδικής λύσης του συστήματος από τον τύπο $x = A^{-1}b$ είναι πολύ πιο δαπανηρός από τη χρήση μεθόδων απαλοιφής για την εύρεση της λύσης και μπορεί να οδηγήσει και σε ανακριβή αποτελέσματα. Για παράδειγμα, ας θεωρήσουμε το τετριμμένο σύστημα $3x = 27$. Εάν χρησιμοποιήσουμε για την εύρεση του x μεθόδους απαλοιφής, θα πάρουμε $x = 9$. Αντίθετα, εάν υπολογίσουμε το x από τον τύπο $x = \frac{1}{3}27$, θα πάρουμε $x = 0.3333 \cdot 27 = 8.9991$ (εάν χρησιμοποιηθεί αριθμητική 4 ψηφίων).

Προβλήματα που σχετίζονται με την επίλυση γραμμικών συστημάτων είναι και τα ακόλουθα:

- Εύρεση πίνακα X έτσι ώστε $AX = B$, όπου B $n \times m$ πίνακας.
- Εύρεση του αντιστρόφου πίνακα
- Υπολογισμός της τάξης πίνακα
- Υπολογισμός της ορίζουσας πίνακα
- Υπολογισμός των κύριων υποοριζουσών πίνακα
- Υπολογισμός μιας ορθοκανονικής βάσης για τον χώρο στηλών και τον πυρήνα ενός πίνακα, καθώς και διαφόρων πινάκων προβολής που σχετίζονται με τον πίνακα A.

Η **παραγοντοποίηση ενός πίνακα** αποτελεί τη βάση για την ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων που εκτελούνται αποτελεσματικά στον υπολογιστή και επιλύουν όλα τα προηγούμενα προβλήματα.
Οι μετασχηματισμοί ισοδυναμίας προσδιορίζουν την **παραγοντοποίηση LU**, η οποία ταυτίζεται με τη διάσημη **απαλοιφή Gauss**, που αποτελεί τη διασημότερη και αρχαιότερη αριθμητική μέθοδο επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος. Η **παραγοντοποίηση QR** εξασφαλίζει την εμφάνιση ενός ορθογώνιου παράγοντα στην ανάλυση ενός πίνακα σε γινόμενο παραγόντων, γεγονός που καθίσταται ιδιαίτερα χρήσιμο για τον προσδιορισμό των βασικών χαρακτηριστικών ενός πίνακα. Η ορθογώνια παραγοντοποίηση που προκύπτει από την **ανάλυση ιδιαζουσών τιμών**, αποτελεί την πιο αξιόπιστη αριθμητική μέθοδο για τον υπολογισμό της τάξης πίνακα, για τον προσδιορισμό ορθοκανονικών βάσεων και προβολών, για τον προσδιορισμό της απόστασης πίνακα από άλλον χαμηλότερης τάξης, και γενικά για τη διαχείριση διαταραχών (γνωστών ως «θορύβων») στα δεδομένα. Η ανάλυση ιδιαζουσών τιμών εφαρμόζεται στη Θεωρία Ελέγχου, στη Θεωρία Συστημάτων, στην Επεξεργασία Σήματος και Εικόνας, και πρόσφατα χρησιμοποιείται στη Μηχανική Μάθηση, όπου απαιτείται η προσέγγιση πινάκων μεγάλων διαστάσεων από αθροίσματα πινάκων χαμηλότερης τάξης.

2. Το Πρόβλημα των Ιδιοτιμών

Να υπολογισθούν όλες οι ιδιοτιμές και τα αντίστοιχα ιδιοδιανύσματα (φάσμα) ενός πίνακα A διάστασης $n \times n$.

Το πρόβλημα των ιδιοτιμών εμφανίζεται, για παράδειγμα, στην επίλυση και την ανάλυση ευστάθειας ενός ομογενούς συστήματος διαφορικών εξισώσεων πρώτης τάξης, στη μελέτη της συμπεριφοράς δυναμικών συστημάτων και σε οικονομικές και χρηματιστηριακές αναλύσεις, όπου απαιτείται ο υπολογισμός ορισμένων μόνο ιδιοτιμών και των αντίστοιχων ιδιοδιανυσμάτων τους. Επίσης, σε πολλές πρακτικές περιπτώσεις, ο πίνακας A είναι συμμετρικός και έτσι έχουμε το συμμετρικό πρόβλημα ιδιοτιμών. Ο κλασικός τρόπος υπολογισμού των ιδιοτιμών ως ρίζες του χαρακτηριστικού πολυωνύμου του πίνακα A, δεν ενδείκνυται να εφαρμοστεί αριθμητικά. Κι αυτό διότι οι ρίζες συγκεκριμένων πολυωνύμων είναι ιδιαίτερα ευαίσθητες σε μικρές διαταραχές στους συντελεστές, με αποτέλεσμα την εμφάνιση μεγάλων σφαλμάτων στις ιδιοτιμές σε ορισμένες περιπτώσεις.

Οι μετασχηματισμοί ομοιότητας οδηγούν σε κατάλληλη παραγοντοποίηση του πίνακα, με τη βοήθεια της οποίας εξασφαλίζεται αριθμητικά αποδεκτός υπολογισμός του φάσματος του πίνακα.

3. Το Πρόβλημα των Ελαχίστων Τετραγώνων

Να προσδιορισθεί διάνυσμα x διάστασης n, έτσι ώστε να ελαχιστοποιείται η ποσότητα $\|Ax - b\|_2$, όπου A είναι ένας πίνακας διάστασης $m \times n$ και b ένα διάνυσμα διάστασης m.

Προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων εμφανίζονται, για παράδειγμα, σε στατιστικές και γεωμετρικές εφαρμογές, όπου απαιτείται η προσαρμογή ενός πολυωνύμου ή μιας καμπύλης σε πειραματικά δεδομένα. Στην περίπτωση που ο πίνακας είναι πλήρους τάξης και $m \geq n$, η μοναδική λύση του προβλήματος των ελαχίστων τετραγώνων δίνεται από τη λύση του συστήματος των κανονικών εξισώσεων $A^T Ax = A^T b$. Όμως η επίλυση αυτού του συστήματος είναι ασταθής, δεδομένου ότι στηρίζεται στον υπολογισμό του γινομένου $A^T A$, η εκτέλεση του οποίου σε αριθμητική κινητής υποδιαστολής επιφέρει σημαντικά σφάλματα στρογγύλευσης.

Χρησιμοποιώντας μια ορθογώνια παραγοντοποίηση του πίνακα δεδομένων, η λύση του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων υπολογίζεται με ευσταθή και αποτελεσματικό τρόπο.

4. Διαχείριση Προβλημάτων Υψηλής Διάστασης

Στην εποχή μας, κυρίαρχο ρόλο παίζει η διαχείριση δεδομένων υψηλής διάστασης, τα οποία εμφανίζονται υπό μορφή πινάκων. Ανάλογα με την εφαρμογή, μπορεί να προκύπτουν πίνακες διάστασης 70000×70000 (π.χ. στη θεωρία δικτύων) ή 246×22716 (π.χ. ο πίνακας δεδομένων ενός στατιστικού μοντέλου).

Η Αριθμητική Γραμμική Αλγεβρα καλείται να αναπτύξει κατάλληλες αριθμητικές μεθόδους για την αποτελεσματική επεξεργασία τέτοιων προβλημάτων. Οι μέθοδοι Krylov μας δίνουν τη δυνατότητα να επιλύουμε ένα πρόβλημα σε έναν άλλο χώρο πολύ μικρότερης διάστασης, με αποτέλεσμα να κυριαρχούν στην επίλυση προβλημάτων με δεδομένα υψηλής διάστασης.

5. Αριθμητική του Υπολογιστή - Θεωρία Ανάλυσης Σφάλματος

Σε κάθε αλγεβρικό υπολογισμό συσσωρεύονται σφάλματα στρογγύλευσης κατά την εκτέλεσή του. Αυτό οφείλεται στην πεπερασμένη ακρίβεια που χαρακτηρίζει την αριθμητική του υπολογιστή. Πώς μπορούμε να ελέγξουμε αυτό το σφάλμα και ενδεχομένως να το βελτιώσουμε;

Όλα τα δεδομένα κωδικοποιούνται και αποθηκεύονται σε λέξεις πεπερασμένων ψηφίων. Τα ψηφία που περισσεύουν αποκόπτονται, με αποτέλεσμα την εισαγωγή σφαλμάτων στρογγύλευσης. Η αξιοπιστία όλων των αριθμητικών υπολογισμών έγκειται στον έλεγχο των σφαλμάτων αυτών και στην προσπάθεια περιορισμού τους. Απαραίτητη λοιπόν είναι η γνώση της αριθμητικής του υπολογιστή και των ιδιαίτερων χαρακτηριστικών της. Έτσι θα μπορέσουμε, αφού πρώτα κατανοήσουμε την αριθμητική κινητής υποδιαστολής, να αναπτύξουμε τεχνικές που θα μας δίνουν τη δυνατότητα εκτίμησης και περιορισμού των σφαλμάτων στρογγύλευσης. Το πρόβλημα των υπολογισμών με πεπερασμένη ακρίβεια, το συναντάμε πλέον και στη καθημερινότητά μας, αφού οποιαδήποτε εφαρμογή στο κινητό μας τηλέφωνο αποθηκεύεται σε μία περιορισμένης χωρητικότητας λέξη.
Η θεωρία ανάλυσης σφάλματος μας παρέχει τα εφόδια με τα οποία μπορούμε να υπολογίσουμε και να δώσουμε κατάλληλα φράγματα για τα εμφανιζόμενα σφάλματα στρογγύλευσης, εξασφαλίζοντας έτσι την ευστάθεια των υπολογισμών μας.

Είδαμε ότι συγκεκριμένες θεωρητικές προσεγγίσεις σε προβλήματα της Γραμμικής Άλγεβρας μπορεί να οδηγήσουν σε υπολογιστικές δυσκολίες και ανακρίβειες στα υπολογιζόμενα αποτελέσματα. Η Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα αντιμετωπίζει διεξοδικά αυτές τις δυσκολίες και αναπτύσσει μεθόδους και αλγορίθμους, με τη βοήθεια των οποίων, μπορούν να ξεπεραστούν τα εμφανιζόμενα αριθμητικά προβλήματα. Οι Επιστημονικοί Υπολογισμοί υλοποιούν, κατά το βέλτιστο δυνατό τρόπο, τους προτεινόμενους αλγορίθμους και δημιουργούν λογισμικό το οποίο επιλύει αποτελεσματικά τα διάφορα προβλήματα που εμφανίζονται σε επιστημονικές και τεχνολογικές εφαρμογές.