Введение в численные методы. Точные методы решения СЛАУ

Баев А.Ж.

Казахстанский филиал МГУ

07 февраля 2019

План на семестр

1. СЛАУ (точные методы)
2. СЛАУ (итерационные методы)
3. решение нелинейных уравнений
4. интерполяция
5. аппроксимация
6. интегрирование
7. дифференцирование

Линейная алгебра

Решение системы линейных алгебраических уравнений:

$$Ax = f$$

где $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $x \in \mathbb{R}^n$, $f \in \mathbb{R}^n$.
Дано A, f. Найти x.

Линейная алгебра (точные методы)

1. Метод Гаусса.
2. Метод прогонки (если A — трёхдиагональная).
3. Метод Холецкого (если $A > 0$).

Метод Гаусса

Пусть $A = LU$, где L — нижнетреугольная (lower), U — верхнетреугольная (upper) матрица с единицами на диагонали:

$$LUx = f$$

Прямой ход: привести матрицу к улучшенному верхнетреугольному виду элементарными преобразованиями строк.

$$Ux = L^{-1}f$$

Обратный ход: привести матрицу к диагональному виду элементарными преобразованиями строк.

$$x = U^{-1}L^{-1}f$$

Метод Гаусса

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & 3 & 3 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Метод Гаусса (прямой ход)

Шаг 1. Ведущий элемент $a_{1,1} = 1$.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 3 & 2 & 2 \\ 2 & 3 & 3 & 3 \\ -1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Действие эквивалентно умножению уравнения слева на матрицу:

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Метод Гаусса (прямой ход)

Шаг 2. Ведущий элемент $a_{2,2} = 2$.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix}$$

Действие эквивалентно умножению уравнения слева на матрицу:

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Шаг 3. Ведущий элемент $a_{3,3} = \frac{1}{2}$.

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{3}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{3}{2} \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ \frac{1}{2} \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

Действие эквивалентно умножению уравнения слева на матрицу:

$$L_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Метод Гаусса (прямой ход)

Прямой ход сводится к действиям:

$$L_3 L_2 L_1 A x = L_3 L_2 L_1 f$$

Обозначим $L_3 L_2 L_1 = L^{-1}$, то есть

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} L_3^{-1}$$

После прямого хода остается матричное уравнение

$$U x = \tilde{f}$$

где $U = L^{-1} A$, $\tilde{f} = L^{-1} f$.

Метод Гаусса (обратный ход)

$$x_4 = f_4 = -1$$

$$x_3 = f_3 - u_{3,4}x_4 = 0$$

$$x_2 = f_2 - u_{2,3}x_3 - u_{2,4}x_4 = 1$$

$$x_1 = f_1 - u_{1,2}x_2 - u_{1,3}x_3 - u_{1,4}x_4 = 2$$

Метод Гаусса (прямой ход)

Прямой ход: привести матрицу к треугольному виду элементарными преобразованиями строк.
Для ведущего элемента $a_{k,k}$:

$$\begin{pmatrix}
a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,k-1} & a_{1,k} & \dots & a_{1,j} & \dots & a_{1,n} \\
0 & a_{2,2} & \dots & a_{2,k-1} & a_{2,k} & \dots & a_{2,j} & \dots & a_{2,n} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & 0 & \dots & a_{k-1,k-1} & a_{k-1,k} & \dots & a_{3,j} & \dots & a_{3,n} \\
0 & 0 & \dots & 0 & a_{k,k} & \dots & a_{k,j} & \dots & a_{k,n} \\
0 & 0 & \dots & 0 & a_{k+1,k} & \dots & a_{k+1,j} & \dots & a_{k+1,n} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & 0 & \dots & 0 & a_{i,k} & \dots & a_{i,j} & \dots & a_{i,n} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
0 & 0 & \dots & 0 & a_{n,k} & \dots & a_{n,j} & \dots & a_{n,n}
\end{pmatrix}$$

$$\tilde{a}_{k,j} := \frac{a_{k,j}}{a_{k,k}}$$

$$\tilde{a}_{i,j} := a_{i,j} - \tilde{a}_{k,j} a_{i,k}$$

для всех i от $(k+1)$ до n и для всех j от $(k+1)$ до n.

Метод Гаусса (обратный ход)

Обратный ход: обращаем улучшенную верхне–треугольную матрицу.
Для искомого x_i:

$$x_i = \tilde{f}_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{i,j} x_j$$

1. Прямой ход:

```
for k := 1 .. n
    for j := k+1 .. n
        A[k][j] := A[k][j] / A[k][k]

    for i := k+1 .. n
        for j := k+1 .. n
            A[i][j] := A[i][j] - A[i][k] * A[k][j]
        f[i] := f[i] - A[i][k] * f[k]
        A[i][k] := 0
```

$$f_1(n) = \sum_{k=1}^{n} \sum_{i=k+1}^{n} \left(2 + \sum_{j=k+1}^{n} 1 \right) = \sum_{k=1}^{n} \sum_{i=k+1}^{n} (2 + n - k) = \sum_{k=1}^{n} (n-k)(n+2-k)$$

Сделаем замену $k = n + 1 - s$:

$$f_1(n) = \sum_{s=1}^{n} (s-1)(s+1) = \sum_{s=1}^{n} s^2 - \sum_{s=1}^{n} 1 = \frac{n(n+1)(2n+1)}{6} - n = \frac{2n^3 + 3n^2 - 5n}{6}$$

Метод Гаусса (псевдокод и асимптотика)

2. Обратный ход:

```
for i := n .. 1
    x[i] := f[i]
    for j := i+1 .. n
        x[i] := x[i] - A[i][j] * x[j]
```

$$f_2(n) = \sum_{i=1}^{n} \left(1 + \sum_{j=i+1}^{n} 1 \right) = \sum_{i=1}^{n} (1 + n - i)$$

Сделаем замену $i = n + 1 - s$:

$$f_2(n) = \sum_{s=1}^{n} s = \frac{n^2 + n}{2}$$

Метод Гаусса (асимптотика)

Алгоритмическая сложность метода Гаусса для решения СЛАУ:

$$f(n) = f_1(n) + f_2(n) = \frac{2n^3 + 3n^2 - 5n}{6} + \frac{n^2 + n}{2} = \frac{n^3 + 3n^2 - n}{3}$$

Асимптотика алгоритмической сложности:

1. прямого хода метода Гаусса $f_1(n) = \Theta(n^3)$;
2. обратного хода метода Гаусса $f_2(n) = \Theta(n^2)$;
3. метода Гаусса для решения СЛАУ $f(n) = \Theta(n^3)$.

Метод Гаусса (теорема об LU–разложении)

Theorem (теорема об LU–разложении)

Пусть все угловые миноры матрицы A отличны от нуля. Тогда матрицу A можно представить единственным образом в виде произведения

$$A = LU$$

где L — нижняя треугольная матрица с ненулевыми диагональными элементами и U — верхняя треугольная матрица с единичной диагональю.

Метод Гаусса (теорема об LU–разложении)

Доказательство.

Существование.

Математическая индукция. База: $n = 2$.

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} \\ a_{2,1} & a_{2,2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{1,1} & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & u_{1,2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Решается в явном виде:

$$\begin{cases} l_{1,1} = a_{1,1} \\ l_{2,1} = a_{2,1} \\ l_{2,2} = \frac{\Delta}{a_{1,1}} \\ u_{1,2} = \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}} \end{cases}$$

□

Метод Гаусса (теорема об LU–разложении)

Обозначим:
A_k — угловой минор матрицы,
b_{k-1} — часть нижней вектор–строки,
a_{k-1} — часть правого вектор–столбца.
Предположение $n = k - 1$: $A_{k-1} = L_{k-1}U_{k-1}$. Переход $n = k$: $A_k = L_k U_k$.

$$\begin{pmatrix} A_{k-1} & a_{k-1} \\ b_{k-1} & a_{k,k} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{k-1} & 0 \\ l_{k-1} & l_{k,k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{k-1} & u_{k-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Решается в явном виде:

$$\begin{cases} L_{k-1}u_{k-1} = a_{k-1} \\ l_{k-1}U_{k-1} = b_{k-1} \\ l_{k-1}u_{k-1} + l_{k,k} = a_{k,k} \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} u_{k-1} = L_{k-1}^{-1}a_{k-1} \\ l_{k-1} = b_{k-1}U_{k-1}^{-1} \\ l_{k,k} = a_{k,k} - l_{k-1}u_{k-1} \end{cases}$$

По условию $detA \neq 0 \Leftrightarrow l_{k,k} \neq 0$
$\Rightarrow$
Разложение $A_k = L_k U_k$ существует, причем L_k и U_k имеют ненулевые диагональные элементы. □

Метод Гаусса (теорема об LU–разложении)

Единственность.

$$L_1 U_1 = L_2 U_2$$

$$U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2$$

Слева верхнетреугольная, справа нижнетреугольная $\Rightarrow$
все матрицы диагональные $\Rightarrow$
слева единичная матрица $\Rightarrow$
$L_1 = L_2$.

$\square$

Метод Гаусса (перестановка ведущего элемента)

Прямой ход метод Гаусса. Усиленно делим на нуль:

$$\begin{pmatrix} 0 & 3 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 & 5 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Действие эквивалентно умножению уравнения слева на матрицу:

$$P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Метод Гаусса (перестановка ведущего элемента)

Обобщение LU разложения:

$$A = PLU$$

где P — перестановочная матрица,
L — нижнетреугольная,
U — верхнетругольная с единицами.

Метод Гаусса (перестановка ведущего элемента)

$$L_n P_n L_{n-1} P_{n-1} \dots L_2 P_2 L_1 P_1 A = U$$

Введём новые матрицы

$$\begin{cases} L'_n & = L_n \\ L'_{n-1} & = P_n L_n P_n^{-1} \\ L'_{n-2} & = P_n P_{n-1} L_{n-1} P_n^{-1} P_{n-1}^{-1} \\ & \dots \\ L'_1 & = P_n P_{n-1} \dots P_2 L_1 P_2^{-1} \dots P_{n-1}^{-1} P_n^{-1} \end{cases}$$

Получаем

$$\underbrace{L'_n L'_{n-1} \dots L'_1}_{L^{-1}} \underbrace{P_n P_{n-1} \dots P_1}_{P^{-1}} \cdot A$$

python

Список списков

```
l = [ [1, 1, 1, 1],
      [1, 3, 2, 2],
      [2, 3, 3, 3],
      [-1, 0, 0, 1] ]
```

не поддерживает матричных действий.
Массивы numpy

```
import numpy as np
...
a = np.array(l)
```

поддерживает матричные действия

python

Список списков

```
l = [ [1, 1, 1, 1],
      [1, 3, 2, 2],
      [2, 3, 3, 3],
      [-1, 0, 0, 1] ]
print(l[3][0])
```

не поддерживает матричных действий.
Массивы numpy

```
import numpy as np
...
a = np.array(l)
print(a[3][0])
```

поддерживает матричные действия

Примитивы numpy

Вектор из 5 единиц

```
a = np.ones(5)
```

Матрица 5 на 6 из чисел 7.0

```
a = np.ones((5, 6)) * 7.0
```

Единичная матрица размера 5

```
a = np.eye(5)
```

Диагональная матрица 5 на 5 с 2 по диагонали и 1 в остальных позициях:

```
a = np.eye(5) + np.ones((5, 5))
```

Найти сумму и максимум всех элементов матрицы

```
v = np.sum(a)
m = np.maximum(a)
```

Срезы numpy

Создать матрицу размера $n \times n$ со случайными значениями:

```
n = 5
a = np.random.rand(n,n)
```

Применить первую строку ко второй строке

```
a[:,1] += a[:,0]
```

Обнулить все элемент первого столбца кроме $a[0][0]$:

```
a[1:,0] = np.zeros(n - 1)
```

Найти максимальный по модулю элемент в последнем столбце матрицы

```
m = np.maximum(np.abs(a[-1,:]))
```

Треугольные матрицы numpy

Оставляет нижнетреугольную матрицу

```
np.tril([[1, 2, 3],
         [4, 5, 6],
         [7, 8, 9]])
np.tril([[1, 2, 3],
         [4, 5, 6],
         [7, 8, 9]],
         -1)
```

Получаем

```
1 0 0
4 5 0
7 8 9
```

и

```
0 0 0
4 0 0
7 8 0
```

linalg

```
import scipy.linalg as sla
```

Разложение матрицы

```
P, L, U = sla.lu(A)
```

Проверка матриц на равенство: $A = LU$ и $P = E$.

```
np.allclose(A, L.dot(U))
np.allclose(P, np.eye(n))
```

Решение уравнения $Ax = b$ методом Гаусса:

```
x = numpy.linalg.solve(A, b)
```

Обратная матрица $C = A^{-1}$:

```
C = numpy.linalg.inv(A)
```

Упражнение

Упражнение 1. Обратная матрица к нижнетреугольной матрице — нижнетреугольная матрица.
Упражнение 2. Даны две верхнетреугольные матрицы $n \times n$. Определить количество умножений пар элементов матриц при перемножении этих матриц.
Упражнение 3. Доказать соотношения для PLU разложения.

reference

Допуск к зачету:
https://pythontutor.ru/

2cm
К первой домашней работе:
https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/