

ДИСЦИПЛИНА	Вычислительная математика (полное наименование дисциплины без сокращений)
ИНСТИТУТ	информационных технологий
КАФЕДРА	прикладной математики (полное наименование кафедры)
ВИД УЧЕБНОГО МАТЕРИАЛА	Материалы для практических/семинарских занятий (в соответствии с пп.1-11)
ПРЕПОДАВАТЕЛЬ	Волощук Сергей Алексеевич, Матяш Екатерина Дмитриевна, Митин Михаил Петрович (фамилия, имя, отчество)
СЕМЕСТР	3, 2023-2024 (указать семестр обучения, учебный год)



Кафедра Прикладной математики
Института информационных технологий
РТУ МИРЭА



Дисциплина
«Вычислительная математика»

2023-2024 уч.г.

Наполнение курса

Объем курса

8 лекционных и 16 практических занятий

Темы практических занятий

1. Элементы теории погрешностей
2. Методы приближения и аппроксимация функций
3. Численные методы решений трансцендентных и алгебраических уравнений
4. Численное интегрирование
5. Численные методы линейной алгебры
6. Численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений
7. Численное решение начально-краевых задач для дифференциальных уравнений в частных производных
8. Быстрое дискретное преобразование Фурье

Практика 5.

Численные методы линейной алгебры

1. Численное решение СЛАУ
2. Прямые методы решения СЛАУ
3. Примеры решения СЛАУ методом Гаусса и ортогонализации



Часть 1. Численное решение СЛАУ

Численные методы линейной алгебры

Рассматриваются численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ).

Численное решение СЛАУ

СЛАУ используются во многих областях науки и техники и являются наиболее часто встречающимся типом задач вычислительной математики. В общем виде СЛАУ из n уравнений с n неизвестными записывается в виде:

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

Здесь \vec{x} - неизвестный вектор решения, \vec{b} - заданный вектор в n -мерном пространстве, а

$$A = \left(\begin{array}{cc|c} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,n} \\ \hline a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,n} \end{array} \right) -$$

линейный оператор в этом пространстве, заданная матрица размером $n * n$ или в другом виде $A = \{a_{i,j}\}$, $i, j = 1, 2, \dots, n$.

Для оценки величины векторов вводится понятие нормы $\|\cdot\|$. Свойства нормы: $\|\vec{x}\| > 0$; $\|\vec{x} + \vec{y}\| < \|\vec{x}\| + \|\vec{y}\|$ – неравенство треугольника

$\|A \cdot B\| < \|A\| \cdot \|B\|$. В задачах линейной алгебры используются, в основном, три нормы: $\|\vec{x}\|_c = \max |x_k|$ – кубическая норма, максимальная компонент вектора, $\|\vec{x}\|_c = \sum_{k=1}^n |x_k|$ – октаэдрическая норма, $\|\vec{x}\|_s = \sum_{k=1}^n |x_k|^2$ – сферическая норма.

Норма матрицы:

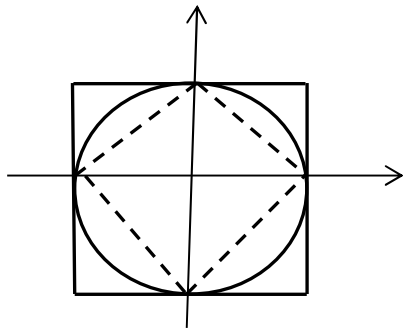
$$\|A\| = \max_{\|\vec{x}\| \neq 0} \frac{\|A \cdot \vec{x}\|}{\|\vec{x}\|} = \max_{\|\vec{x}\|=1} \|A \cdot \vec{x}\| - \text{такая норма называется согласованной.}$$

Норма матрицы характеризует максимально возможное относительное увеличение по норме ненулевого вектора при воздействии на него матрицы.

Согласованные нормы: $\|A\|_k = \max_i \sum_{l=1}^n |a_{i,l}|$, $\|A\|_o = \max_l \sum_{i=1}^n |a_{i,l}|$, $\|A\|_s =$

$$\sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{l=1}^n |a_{i,l}|^2}$$

На рисунке приведены границы областей $\|\vec{x}\| \leq 1$ для кубической, сферической и октаэдрической норм, $n=2$.



Доказывается, что если определитель матрицы не равен нулю, то СЛАУ имеет единственное решение. Ниже будем полагать, что это условие выполняется. Однако, отличие определителя A от нуля не может служить гарантией того, что решение СЛАУ будет найдено численно с заданной точностью.

Причиной этого может быть как плохая обусловленность самой системы, так и выбранного алгоритма. Решение системы \vec{x}^* является общей пересечения n гиперплоскостей. Если параметры гиперплоскостей близки, то небольшое изменение их (например, из-за ошибки округления) приводит к значительным ошибкам в результате. В

результате, в пределах точности задания исходных данных (например, в пределах ошибки округления из-за ограниченного формата числовых данных ЭВМ) может существовать множество различных решений, удовлетворяющих системе

Существуют два основных класса методов для решения СЛАУ – прямые и итерационные. Прямые методы характеризуются тем, что при абсолютной точности вычислений (на гипотетической бесконечноразрядной ЭВМ) точное решение СЛАУ может быть получено с помощью конечного числа арифметических операций. Итерационные методы характеризуются тем, что даже при абсолютной точности вычислений за конечное число арифметических операций может быть получено лишь приближенное решение системы, хотя возможно и как угодно близкое к точному значению.



Часть 2. Прямые методы решения СЛАУ

Прямые методы решения СЛАУ

Количество операций для решения системы $\sim n^3$. Матрица A либо неявно обращается, либо представляется в виде произведения матриц удобных для обращения.

В первом случае матрица A последовательно преобразуется с помощью элементарных (эквивалентных) преобразований:

1. Перестановка столбцов и строк.
2. Умножение столбцов и строк на число.
3. Прибавление к строке (столбцу) другой строки, умноженной на число.

Каждое элементарное преобразование можно представить в виде матрицы L_i , в результате последовательного умножения A на L_i , она преобразуется в единичную матрицу:

$$L_n \dots L_2 L_1 A \cdot \vec{x} = L_n \dots L_1 \vec{b}$$

Метод Гаусса (Метод исключений)

Формально, метод Гаусса основан на последовательном применении матриц

$$L_i = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & l_{ii} & 0 \\ 0 & l_{ij} & 0 \\ 0 & l_{ni} & 0 \end{pmatrix} ; \quad l_{ii} = \frac{1}{a_{ii}} ; \quad l_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}$$

Пример для матрицы (3×3) :

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{-1} & 0 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 \\ -\frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \frac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - \frac{a_{12} \cdot a_{21}}{a_{11}} & a_{23} - \frac{a_{21} \cdot a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{32} - \frac{a_{12} \cdot a_{31}}{a_{11}} & a_{33} - \frac{a_{13} \cdot a_{31}}{a_{11}} \end{pmatrix}$$

Действие матрицы L_i преобразуют элементы i -го столбца матрицы A ниже диагонали в нулевые (т.е. исключают их).

Вычислительная схема метода Гаусса

В каждом уравнении выделяется ведущий элемент, на который производится деление; пусть это будет a_{11} . Делим первое уравнение на a_{11} :

$$c_{1j} = \frac{a_{1j}}{a_{11}} \quad g_1 = \frac{b_1}{a_{11}}$$

Все остальные элементы преобразуются по схеме:

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - a_{i1} \cdot \frac{a_{1j}}{a_{11}}; \quad b_i^{(1)} = b_i - a_{i1} \cdot \frac{b_1}{a_{11}}$$

[illegible]

На втором шаге ведущим элементом выбирается $a_{22}^{(1)}$, на него делится вторая строка, а все остальные элементы преобразуются по формуле:

$$c_{2j} = \frac{c_{2j}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}; g_2 = \frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}};$$

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{i2}^{(1)} \cdot \frac{a_{2j}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}; b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - a_{i2}^{(1)} \cdot \frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}};$$

Элементы во втором столбце с $i > 2$ становятся равны 0. В результате таких преобразований, мы приходим к верхней треугольной матрице с единичной диагональю:

$$\begin{pmatrix} 1 & c_{12} & \dots & c_{1n} \\ 0 & 1 & \dots & c_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \dots \\ g_n \end{pmatrix}$$

Преобразование к верхней треугольной матрице называется прямым ходом.

Далее следует обратный ход: начиная с x_n , последовательно вычисляются компоненты вектора:

$$x_n = g_n; \quad x_{n-1} = g_{n-1} - c_{n-1,n}x_n;$$

$$x_k = g_k - \sum_{i=k+1}^n c_{ki}x_i, \quad k = n, n-1, \dots, 1.$$

В машинных расчетах в качестве ведущего элемента обычно выбирается максимальный элемент i - го столбца с $j > i$ или строки a_{ij} с $i > j$.

Эта строка (или столбец) переставляется на место i -ой строки (столбца). Такой выбор уменьшает ошибки округления. При ручных расчетах элементы матрицы записываются вместе с элементами вектора \vec{b} в расширенную матрицу:

$$\left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & b_3 \end{array} \right)$$

далее

из

соображений удобства выбирают ведущий элемент, а преобразование остальных элементов на одном шаге прямого хода метода Гаусса проводят по *правилу прямоугольника*. В матрице выделяется прямоугольник, на главной диагонали которого расположены ведущий и преобразуемый элементы.

Пусть a_{ii} - ведущий элемент, тогда

$$a_{kt}^{(1)} = a_{kt} - \frac{a_{ki}a_{it}}{a_{ii}}.$$

Из преобразуемого элемента вычитается произведение элементов, стоящих на побочной диагонали, деленное на ведущий элемент.

Ортогонализация матриц

Матрица называется ортогональной, если $A \cdot A^T = D$, D - диагональная матрица, т.е. в ней отличны от нуля только диагональные элементы, если $A \cdot A^T = E$, то A - ортонормированная матрица. Любая неособенная матрица A может быть представлена в виде: $A = R \cdot T$, R - ортогональная, а T – верхняя треугольная матрица с единичной диагональю.

Решение имеет вид: $R^T \cdot R \cdot T = R^T \vec{b}$, $D \cdot T = R^T \vec{b}$, $T = D^{-1} R^T \vec{b}$.

Далее следует обратный ход.

Рассмотрим матрицу A , как набор вектор – столбцов \vec{a}_i , $A = [\vec{a}_1 | \vec{a}_2 | \dots | \vec{a}_n]$ - вектора \vec{a}_i - линейно независимы, т.к. $\det A \neq 0$. Выберем первый столбец матрицы R - \vec{r}_1 , равным \vec{a}_1 ; $\vec{r}_i = \vec{a}_1$.

Запишем $\vec{a}_2 = t_{12} \vec{r}_1 + \vec{r}_2$, условие ортогональности R $(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = 0$ позволяет получить t_{12} :

$$(\vec{r}_1, \vec{a}_2) = t_{12} \cdot (\vec{r}_1, \vec{r}_1), t_{12} = \frac{(\vec{r}_1, \vec{a}_2)}{(\vec{r}_1, \vec{r}_1)},$$

следовательно, известен и вектор $\vec{r}_2 = \vec{a}_2 - t_{12}\vec{r}_1$. Аналогичным образом представляется и $\vec{a}_3 = t_{13} \cdot \vec{r}_1 + t_{23} \cdot \vec{r}_2 + \vec{r}_3$, где

$$t_{13} = \frac{(\vec{r}_1, \vec{a}_3)}{(\vec{r}_1, \vec{r}_1)}, t_{23} = \frac{(\vec{r}_2, \vec{a}_3)}{(\vec{r}_2, \vec{r}_2)}.$$

В общем случае получим выражения:

$$\vec{r}_k = \vec{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} t_{ik} \cdot \vec{r}_i, t_{ik} = \frac{(\vec{r}_i, \vec{a}_k)}{(\vec{r}_i, \vec{r}_i)}.$$

Покажем, что t_{ik} - элементы матрицы Т. Действительно:

$$\vec{a}_1 = \vec{r}_1$$

$$\vec{a}_2 = t_{12} \cdot \vec{r}_1 + \vec{r}_2$$

$$\vec{a}_3 = t_{13} \cdot \vec{r}_1 + t_{23} \cdot \vec{r}_2 + \vec{r}_3, \text{ или иначе:}$$

.....

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} & \dots \\ r_{21} & r_{22} & r_{23} & \dots \\ r_{31} & r_{32} & r_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 & t_{12} & t_{13} & \dots \\ 0 & 1 & t_{23} & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Решение системы уравнений методом ортогонализации

Оптимальной является следующая схема, основанная на свойствах вектора \vec{r} .

Запишем систему $A \cdot \vec{x} = \vec{b}$ в виде: $\vec{a}_1 \cdot x_1 + \vec{a}_2 \cdot x_2 + \dots + \vec{a}_n \cdot x_n = \vec{b}$

Из структуры векторов \vec{r} следует, что $(\vec{r}_i, \vec{a}_j) = 0, (i > j)$.

Умножаем систему слева на \vec{r}_n : $\vec{r}_n \cdot (\vec{a}_1 \cdot x_1 + \vec{a}_2 \cdot x_2 + \dots + \vec{a}_n \cdot x_n) = \vec{r}_n \cdot \vec{b}$,

в уравнении остается одно слагаемое: $(\vec{r}_n \cdot \vec{a}_n) \cdot x_n = (\vec{r}_n \cdot \vec{b})$.

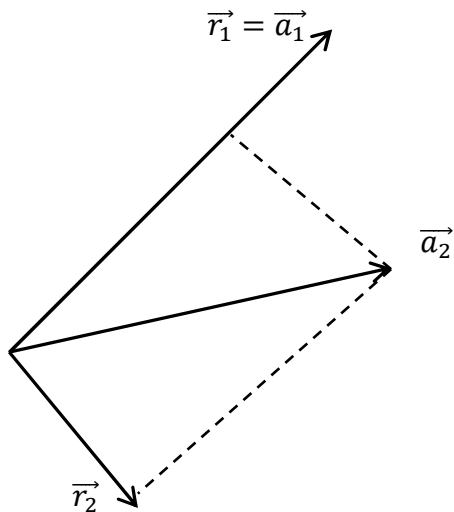
$$x_n = \frac{(\vec{r}_n, \vec{b})}{(\vec{r}_n, \vec{a}_n)};$$

$$\vec{a}_1 \cdot x_1 + \dots + \vec{a}_{n-1} \cdot x_{n-1} = \vec{b} - \vec{a}_n \frac{(\vec{r}_n \cdot \vec{b})}{(\vec{r}_n \cdot \vec{a}_n)} = \vec{b}^{(1)}$$

Полученную систему умножим на \vec{r}_{n-1} , находим x_{n-1} и вычисляем $\vec{b}^{(2)}$ и т.д.

$$x_i = \frac{(\vec{r}_i, \vec{b}^{(n-i)})}{(\vec{r}_i, \vec{a}_i)}; \quad \vec{b}^{(i)} = \vec{b}^{(i-1)} - x_{n-i+1} \cdot \vec{a}_{n-i+1}.$$

Геометрическая интерпретация метода ортогонализации





Часть 3. Примеры решения СЛАУ методом Гаусса и ортогонализации

Пример, метод Гаусса:

Последовательно выбираются ведущие элементы. Преобразованная с помощью правила прямоугольника матрица записывается в следующую расширенную матрицу, подчеркнуты ведущие элементы:

$$\begin{bmatrix} \underline{1} & 1 & -1 & | & 0 \\ 2 & 1 & 1 & | & 7 \\ 1 & -1 & 1 & | & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & | & 0 \\ 0 & \underline{-1} & 3 & | & 7 \\ 0 & -2 & 2 & | & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow$$
$$\Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & | & 0 \\ 0 & 1 & -3 & | & -7 \\ 0 & 0 & \underline{-4} & | & -12 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & -1 & | & 0 \\ 0 & 1 & -3 & | & -7 \\ 0 & 0 & 1 & | & 3 \end{bmatrix}$$

После чего с помощью обратного хода находятся компоненты вектора: $x_3 = 3$,
 $x_2 = -7 - (-3)3 = 2$, $x_1 = 0 - 2 + 3 = 1$.

Метод ортогонализации:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & 1 & 1 & 7 \\ 1 & -1 & 1 & 2 \end{array} \right]$$

СЛАУ записывается в векторном представлении и выбирается первый вектор ортогональной матрицы R

$$\vec{a}_1 x_1 + \vec{a}_2 x_2 + \vec{a}_3 x_3 = \vec{b}$$

$$\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \vec{a}_1$$

Вектор \vec{a}_2 записывается в виде линейной комбинации двух ортогональных векторов, умножается скалярно на \vec{r}_1 и определяется коэффициент t_{12} :

$$(\vec{r}_1, \vec{a}_2) = t_{12} (\vec{r}_1, \vec{r}_1) + (\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$t_{12} = \frac{(\vec{r}_1, \vec{a}_2)}{r_1^2} = \frac{1 + 2 - 1}{1 + 4 + 1} = \frac{1}{3}$$

Далее вычисляется \vec{r}_2 :

$$\vec{r}_2 = \vec{a}_2 - t_{12}\vec{r}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \\ -\frac{4}{3} \end{pmatrix}.$$

Вычисляется вектор \vec{r}_3 :

$$\vec{a}_3 = t_{13}\vec{r}_1 + t_{23}\vec{r}_2 + \vec{r}_3,$$

$$t_{13} = \frac{(\vec{r}_1, \vec{a}_3)}{r_1^2} = \frac{-1 + 2 + 1}{6} = \frac{1}{3}, t_{23} = \frac{(\vec{r}_2, \vec{a}_3)}{r_2^2} = \frac{-\frac{2}{3} + \frac{1}{3} - \frac{4}{3}}{\frac{4}{9} + \frac{1}{9} + \frac{16}{9}} = -\frac{5}{7}$$

$$\vec{r}_3 = \vec{a}_3 - t_{13}\vec{r}_1 - t_{23}\vec{r}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} + \frac{5}{7} \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ \frac{1}{3} \\ -\frac{4}{3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{6}{7} \\ \frac{4}{7} \\ -\frac{2}{7} \end{pmatrix}$$

$$A = RT = \begin{pmatrix} 1 & \frac{2}{3} & -\frac{6}{7} \\ 2 & \frac{1}{3} & \frac{4}{7} \\ 1 & -\frac{4}{3} & -\frac{2}{7} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & \frac{1}{3} \\ 0 & 1 & -\frac{5}{7} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Вычисление компонент вектора \vec{x} :

$$\vec{a}_1 \cdot x_1 + \vec{a}_2 \cdot x_2 + \vec{a}_3 \cdot x_3 = \vec{b}, \quad x_3 = \frac{(\vec{r}_3, \vec{b})}{(\vec{r}_3, \vec{a}_3)} = \frac{0 + 4 - \frac{4}{7}}{\frac{6}{7} + \frac{4}{7} - \frac{2}{7}} = 3;$$

$$\vec{a}_1 x_1 + \vec{a}_2 x_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 7 \\ 2 \end{pmatrix} - 3 \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix} = \vec{b}^{(1)},$$

$$x_2 = \frac{(\vec{r}_2, \vec{b}^{(1)})}{(\vec{r}_2, \vec{a}_2)} = \frac{2 + \frac{4}{3} + \frac{4}{3}}{\frac{2}{3} + \frac{1}{3} + \frac{4}{3}} = 2;$$

$$\vec{a}_1 x_1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ -1 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \vec{b}^{(2)}, \quad x_1 = \frac{(\vec{r}_1, \vec{b}^{(2)})}{(\vec{r}_1, \vec{a}_1)} = 1.$$