Ответы на контрольные вопросы

1. **Каковы условия применимости метода Гаусса без выбора и с выбором ведущего элемента?**

   Пусть СЛАУ задана в матричном виде как $Ax = b$. Тогда главным условием применимости метода Гаусса в обоих упомянутых в вопросе случаях является неравенство нулю определителя матрицы системы: $\det A \neq 0$.

   Если метод Гаусса применяется без выбора ведущего элемента, то необходимо учитывать следующее условие: $a_{ii}^{(i-1)} \neq 0$. Это нужно для того, чтобы избежать деления на ноль и, как следствие, аварийного завершения программы.

   В случае выбора главного элемента достаточно неравенства нулю определителя матрицы системы, так как деление производится на наибольший по модулю коэффициент при a_{ii}, что обеспечивает устойчивость вычислений.

2. **Докажите, что если** $\det A \neq 0$ **, то при выборе главного элемента в столбце среди элементов, лежащих не выше главной диагонали, всегда найдется хотя бы один элемент, отличный от нуля.**

   $\square$ «От противного»:

   Пусть на k-том шаге метода Гаусса все элементы в k-том столбце начиная с k-того равны нулю. Тогда k-тый столбец является линейной комбинацией первых $k-1$ столбцов $\Rightarrow$ определитель матрицы равен нулю. Так как элементарные преобразования не обнуляют определитель, а для исходной матрицы $\det A \neq 0$, получим противоречие $\square$

3. **В методе Гаусса с полным выбором ведущего элемента приходится не только переставлять уравнения, но и менять нумерацию неизвестных. Предложите алгоритм, позволяющий восстановить первоначальный порядок неизвестных.**

   Для метода Гаусса с полным выбором ведущего элемента необходимо завести массив перестановок, который будет учитывать порядок переменных в ответе. То есть изначально он может выглядеть так:

   $$\text{permutations} = [0, 1, \ldots, n-1].$$

   Если в ходе работы программы меняются местами i-й и j-й столбцы, то меняются местами и числа i и j в массиве перестановок. Затем, когда найден вектор решения $\tilde{X}$ с измененным порядком неизвестных, находим X с правильным порядком переменных.

4. **Оцените количество арифметических операций, требуемых для QR-разложения произвольной матрицы A размера $n \times n$.**

   На каждом шаге алгоритма для обнуления поддиагональных элементов столбца i ($i = 0, \dots, n-1$) выполняются следующие действия для каждой строки j ($j = i+1, \dots, n-1$):

   4.1. **Вычисление коэффициентов вращения.** Для пары элементов a_{ii} и a_{ji} вычисляются коэффициенты c и s:

   $$c_{ij} = \frac{a_{ii}^{(i)}}{\sqrt{\left(a_{ii}^{(i)}\right)^2 + \left(a_{ji}^{(i)}\right)^2}}, \quad s_{ij} = \frac{a_{ji}^{(i)}}{\sqrt{\left(a_{ii}^{(i)}\right)^2 + \left(a_{ji}^{(i)}\right)^2}}.$$

   Эта процедура требует **5 операций**: 2 возведения в квадрат, 1 извлечение квадратного корня, 1 сложение и 2 деления.

   4.2. **Применение вращения.** Вращение применяется к строкам i и j матрицы, начиная с столбца $k = i$ (так как элементы левее уже нулевые) и до столбца $k = n-1$. Для каждого столбца k выполняются операции:

   $$a_{ik} = c \cdot a_{ik} + s \cdot a_{jk},$$
   $$a_{jk} = -s \cdot a_{ik} + c \cdot a_{jk},$$

   Это составляет 4 операции умножения. Для одного вращения (i, j) количество таких элементов равно $(n - i)$.

   4.3. **Построение матрицы Q.** К начальной матрице $Q = I$ применяются те же вращения, что и к матрице A. Для каждого вращения (i, j) необходимо обновить две строки матрицы Q, причем для каждого столбца k ($k = 0, \dots, n-1$) выполняются 4 операции:

   $$q_{ik} = c \cdot q_{ik} + s \cdot q_{jk},$$
   $$q_{jk} = -s \cdot q_{ik} + c \cdot q_{jk},$$

   Общее количество операций складывается из операций на всех шагах.

   - Количество вращений: Для каждого столбца i требуется обнулить $(n-i-1)$ элементов ниже диагонали. Таким образом, общее количество вращений (пар (i, j)) равно:
   $$\sum_{i=0}^{n-1} (n - i - 1) = \frac{n(n-1)}{2}.$$
   С учетом операций на вычисление коэффициентов: $\dfrac{5n(n-1)}{2}$.

- Операции на применение вращений: Для вращения, применяемого к строкам i и j, количество операций равно $4(n-i)$. Суммируем по всем i и j:
$$\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n-1}4(n-i)=4\sum_{i=0}^{n-1}(n-i)(n-i-1).$$
Сделаем замену $k=n-i$. Тогда i меняется от 0 до $n-1$, а k меняется от n до 1:
$$4\sum_{k=1}^{n}k(k-1)=4\sum_{k=1}^{n}(k^2-k)=4\left(\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}-\frac{n(n+1)}{2}\right).$$
Упростим выражение:
$$\begin{aligned}4\left(\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}-\frac{n(n+1)}{2}\right)&=4\left(\frac{n(n+1)(2n+1)-3n(n+1)}{6}\right)=\\=4\left(\frac{n(n+1)((2n+1)-3)}{6}\right)&=4\left(\frac{n(n+1)(2n-2)}{6}\right)=\\=4\left(\frac{2n(n+1)(n-1)}{6}\right)&=\frac{4n(n^2-1)}{3}.\end{aligned}$$
Эта часть имеет порядок $O(n^3)$.
- Операции на построение матрицы Q: Для каждого вращения (i,j) необходимо обновить все n столбцов матрицы Q, что требует $4n$ операций:
$$\sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n-1}4n=4n\cdot\frac{n(n-1)}{2}=2n^2(n-1)=2n^3-2n^2.$$
Эта часть также имеет порядок $O(n^3)$.

Суммируя все вклады:
$$\begin{aligned}N&=\frac{4n(n^2-1)}{3}+2n^2(n-1)+\frac{5n(n-1)}{2}\\&=\frac{4n^3}{3}-\frac{4n}{3}+2n^3-2n^2+\frac{5n^2}{2}-\frac{5n}{2}\\&=\left(\frac{4}{3}+2\right)n^3+\left(-\frac{4}{3}-\frac{5}{2}\right)n+\left(-2+\frac{5}{2}\right)n^2\\&=\frac{10}{3}n^3+\frac{1}{2}n^2-\frac{23}{6}n.\end{aligned}$$

Таким образом, асимптотическая сложность QR-разложения составляет $\boldsymbol{O(n^3)}$.

5. **Что такое число обусловленности и что оно характеризует? Имеется ли связь между обусловленностью и величиной определителя матрицы? Как влияет выбор нормы матрицы на оценку числа обусловленности?**

Величину

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

называют числом обусловленности матрицы A. Матрицы с большим числом обусловленности называются плохо обусловленными, в противном случае — хорошо обусловленными.

Из оценки $\|\delta x\| \leqslant \|A^{-1}\|\|\delta f\|$ следует, что чем меньше определитель A, тем больше определитель A^{-1}, а значит, больше постоянная при $|\delta f\|$ и, соответственно, больше влияния погрешностей правой части на погрешности решения.

6. **Как упрощается оценка числа обусловленности, если матрица является:**

   6.1. диагональной;

   6.2. симметричной;

   6.3. ортогональной;

   6.4. положительно определённой;

   6.5. треугольной?

Оценка числа обусловленности вобщем случае:

$$cond A \geqslant \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|}$$

а) Для диагональной матрицы:

$$cond A = \|A^{-1}\|_1 \cdot \|A\|_1 = \max_j \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{|a_{ij}|} \cdot \max_j \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| = \frac{\max\limits_j |a_{jj}|}{\min\limits_j |a_{jj}|}$$

Для $\|\cdot\|_\infty$ аналогично.

б) Для симметричной матрицы:

Спектральная норма:

$$\|A\|_s = \left(\max_j \mu_j\right)^{1/2}, \quad \mu_j \text{ – сингулярные числа (собств. зн. матрицы } A^*A).$$

Если элементы матрицы вещественные, то $A^* {=} A \Rightarrow \mu_j$ равны квадратам собственных значений A, т.е. $\|A\|_s = \max\limits_j |\lambda_j|$, λ_i - собственные значения A. Для симметричной матрицы существует ортогональное разложение $A = QDQ^T$, где Q - ортогональная матрица, D - диагональная матрица, состоящая из собственных значений. Тогда $A^{-1} = Q^T D^{-1} Q$.

$$\mathrm{cond}A = \|A^{-1}\|_s \cdot \|A\|_s = \max_j |\lambda_j^{-1}| \cdot \max_j |\lambda_j| = \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$$

в) Для ортогональной матрицы:

Спектральная норма:

$$\|A\|_s = \left(\max_j \mu_j\right)^{1/2}, \quad \mu_j - \text{сингулярные числа (собств. зн. матрицы } A^*A).$$

Для вещественной матрицы $A^* = A^T$, тогда $A^*A = A^TA = I \Rightarrow \mu_j = 1\ \forall i = 1,...,n$, получим

$$\mathrm{cond}A = \|A^{-1}\|_s \cdot \|A\|_s = \|A^T\|_s \cdot \|A\|_s = \left(\max_j \mu_j\right)^{1/2}\left(\max_j \mu_j\right)^{1/2} = \max_j \mu_j = 1$$

г) Для положительно определенной матрицы собственные значения положительные, получим:

$$condA \geqslant \frac{\lambda_{max}}{\lambda_{min}}$$

д) Для треугольной матрицы собственный значения элементы на главной диагонали, получим

$$condA \geqslant \frac{\max\limits_i a_{ii}}{\min\limits_i a_{ii}}$$

7. **Применимо ли понятие числа обусловленности к вырожденным матрицам?**

   Понятие числа обусловленности не применимо к вырожденным матрицам, так как они не имеют обратных. Из выражения для числа обусловленности

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

   следует, что в таком случае посчитать число обусловленности для вырожденной матрицы невозможно, и его принято считать бесконечностью.

8. **В каких случаях целесообразно использовать метод Гаусса, а в каких—методы, основанные на факторизации матрицы?**

   Метод Гаусса эффективен, когда нужно решить систему с одной правой частью, матрица не имеет специальной структуры (не симметричная, не положительно определенная и т.д.),требуется простота реализации для разовых вычислений.

   Методы факторизации целесообразны, когда нужно решить много систем с одной матрицей и разными правыми частями (факторизацию делают один раз), матрица имеет специальные свойства.

9. **Как можно объединить в одну процедуру прямой и обратный ход метода Гаусса? В чём достоинства и недостатки такого подхода?**

   Для того, чтобы объединить прямой и обратный ход метода Гаусса в одну процедуру, можно на каждом шаге прямого хода не только нормировать ведущий элемент, но и занулять остальные элементы этого столбца. Тогда в одном большом цикле мы сможем сразу получить решение системы уравнений.

Достоинства:

- решение получено сразу, без использования обратного хода;
- интуитивно понятный метод, связанный с элементарными преобразованиями строк матрицы.

Недостатки:

- меньше устойчивость численного решения: быстрее накапливается ошибка из-за операций над элементами как под главной диагональю, так и над ней;
- большее число операций: требует примерно в 2 раза больше числа арифметических операций по сравнению с методом Гаусса

10. **Объясните, почему, говоря о векторах, норму $\|\cdot\|_1$ часто называют октаэдрической, норму $\|\cdot\|_2$ — шаровой, а норму $\|\cdot\|_\infty$ — кубической.**

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|, \qquad \|x\|_2 = \left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2\right)^{1/2}, \qquad \|x\|_\infty = \max_i |x_i|;$$

Соотвествующие единичные шары ($\|x\| \leqslant 1$) в данных нормах при изображении в декартовых координатах представляют собой: октаэдр для $\|\cdot\|_1$, шар для $\|\cdot\|_2$, куб для $\|\cdot\|_\infty$.