Вычислительный практикум

Летят два крокодила.
Один красный, другой направо.

Татьяна Олеговна Евдокимова
t.evdokimova@spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет

14 февраля 2025

Формальности

- Курс заканчивается зачетом; зачет ставится на основании сданных заданий.
- Для сдачи задания нужно:
  - показать работу программы, пояснить её и теорию, ответить на возникшие вопросы;
  - если довели дело до комиссии: отчеты по каждому заданию на корпоративную почту мне и председателю комиссии не позднее, чем за сутки до даты комиссии; на самой комиссии — показывать задачи и пояснять отчет.
- Реализовывать алгоритмы можно на чем угодно.
- Литература: много и разная.

Примерное содержание курса

Часть I: 8 из 9

Числа обусловленности и округление
Точные методы решения СЛАУ
Итерационные методы решения СЛАУ
Все с.ч.
Частичная задача с.ч.
Краевая задача для ОДУ 2-го порядка (сетки)
Краевая задача для ОДУ 2-го порядка (проекционные методы)
Уравнение теплопроводности (сетки)
Эллиптическое уравнение (сетки)

Часть II: 1 $\vee$ 2 из 2

Безусловная оптимизация
Условная оптимизация

Часть III

Метод Монте-Карло
МКЭ
Выпуклая оболочка/кластеризация/?

Комментарии к содержанию

- Задачи оцениваются в баллах (обычно — 10 за задачу, но могут быть бонусы)
- Условия для зачета в баллах:

	если сдано **к** 7 мая	если сдано **до** зачета	если сдача начата на зачете	если сдача начата после зачета
120		A	D	E
110		B	E	
100	A	C		
90	B			
Обязательно	Часть I: 8 из 9 Часть II: 1 из 2	Часть I: 8 из 9 Часть II вся	Часть I: 8 из 9 Часть II вся	Часть I: 8 из 9 Часть II вся

При сдаче задачи:

- Постановка задачи, к которой применяется метод.
- Теорминимум (краткое описание методов, включающее также оценки точности и минимальное обоснование корректности).
- Описание численного эксперимента (какие данные есть, что хочется получить, как проверить результат, что будет считаться успешным результатом).
- Результаты численного эксперимента (описание тестов, полученные результаты в наглядной форме — графики, таблицы).
- Анализ результатов (причины отклонений, если они есть, экспериментальная точность метода на основе тестов, оценка применимости метода).

Требования к коду:

- читабельный (выполнен в едином стиле, с некоторыми комментариями, особенно в вводимых данных);
- без использования сложных конструкций тематически близких к задаче, которые ещё не были реализованы самостоятельно в предыдущих заданиях (например стандартное вычисление определителя в методе Гаусса решения СЛАУ);
- оригинальность.

Требования к тестам:

- Количество — 3–5 штук минимум (не клонов, а с содержательными отличиями).
- Уникальные наборы тестов для каждого обучающегося.
- Не только тривиальные тесты.

Организационные детали

- Можно теорию изучать самостоятельно; на удобной скорости.
- Презентации с теоретическим материалом и постановками задач будут распространяться.
- На занятиях теоретический материал будет поясняться. Возможно, про несколько заданий за раз.

Влияние ошибок округления на решение СЛАУ. Числа обусловленности

Литература к заданию 1

1. Н.Н.Калиткин, Л.Ф.Юхно, Л.В.Кузьмина, Количественный критерий обусловленности систем линейных алгебраических уравнений // Матем. моделирование, 2011, том 23, номер 2, 3–26.
2. Д.К.Фаддеев, В.Н.Фаддеева, Вычислительные методы линейной алгебры.
3. А.Н.Пакулина, Практикум по методам вычислений, часть 1.

Влияние ошибок округления на решение СЛАУ. Числа обусловленности

Есть СЛАУ вида $A\mathrm{x} = \mathrm{b}$.

В точных методах — теоретически точное решение. Но:

- округление;
- исчезновение значащих цифр в результате вычитания близких друг другу величин;

плюс

- может быть неточность исходных данных ($A \to \tilde{A}$, $\mathrm{b} \to \tilde{\mathrm{b}}$).

В итоге — приближенное решение.

- Вопрос об оценке качества приближения.
- Вопрос об оценке корректности оценки.

Примеры «плохих» задач

Пример 1. Пусть $A = \begin{pmatrix} 1 & 0{,}99 \\ 0{,}99 & 0{,}98 \end{pmatrix}$, $\mathrm{b} = \begin{pmatrix} 1{,}99 \\ 1{,}97 \end{pmatrix}$. Тогда решение $\mathrm{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

А если взять $\tilde{\mathrm{b}} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}$, то решением будет $\tilde{\mathrm{x}} = \begin{pmatrix} 200 \\ -200 \end{pmatrix}$.

Пример 2: матрица Гальберта $H = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \dots \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \dots \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}$

Качественные критерии = числа обусловленности

Спектральный критерий обусловленности. За число обусловленности матрицы принимается величина $\mathrm{cond}_s = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ и $\mathrm{cond}_s > 10^4$ — признак плохой обусловленности.

Пример неадекватной работы критерия: диагональная матрица.

Качественные критерии = числа обусловленности

Объемный критерий (критерий Ортеги) ($\approx$ отношение объема параллелепипеда, построенного на строках матрицы как на ребрах, к объему прямоугольного параллелепипеда с теми же ребрами):

$$\mathrm{cond}_v = \frac{\prod_{n=1}^{N} \sqrt{\sum_{m=1}^{N} a_{nm}^2}}{|\det A|}$$

Пример неадекватной работы: трехдиагональная матрица с $a_{nn} = 2$, $a_{n,n\pm1} = -1$. ($\mathrm{cond}_v = 5 \times 6^{N/2-1}/(N+1)$ при $N \geq 2$)

Качественные критерии = числа обусловленности

Угловой критерий ($\approx$ величина, обратная синусу наименьшего из углов, образованных $(N-1)$-мерными гранями на ребрах a_m, $m \neq n$, и оставшимся ребром a_n)

$$\mathrm{cond}_a = \max_n(|\mathsf{a}_n| \cdot |\mathsf{c}_n|),$$

a_n — n-я строка матрицы A,
c_m — m-й вектор-столбец матрицы $C = A^{-1}$.

Формулировка задания 1

Для СЛАУ с некоторой матрицей A:

- вычислить числа обусловленности;
- поварьировав матрицу и/или правую часть, вычислить $|x - \tilde{x}|$;
- посмотреть, есть ли зависимость между величинами чисел обусловленности и погрешностью решения.

Для тестов можно брать:

- матрицы Гильберта разного порядка;
- рандомные;
- системы из методички А.Н.Пакулиной, часть 1;
- какие-нибудь хорошие матрицы (например, трехдиагональные с диагональным преобладанием).

Находить решение СЛАУ можно встроенными функциями.

LU-разложение

$A = LU$, L — нижняя треугольная с 1 на диагонали, U — верхняя треугольная. Получается при прямом ходе метода Гаусса без выбора главного элемента.

На первом шаге метода Гаусса система приводится к виду $A^{(1)}\mathrm{x} = \mathrm{b}^{(1)}$. Обозначим

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\mu_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\mu_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\mu_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \ \mu_{i1} = a_{i1}/a_{11}$$

тогда $A^{(1)} = M_1 A$, $\mathrm{b}^{(1)} = M_1 \mathrm{b}$.

На втором шаге метода Гаусса получается система $A^{(2)}\mathrm{x} = \mathrm{b}^{(2)}$, где $A^{(2)} = M_2 A^{(1)}$, $\mathrm{b}^{(2)} = M_2 \mathrm{b}^{(1)}$,

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\mu_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & -\mu_{n2} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \ \mu_{i2} = a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)}.$$

И т.д. В итоге, $A^{(n-1)} = M_{n-1} \dots M_2 M_1 A$, $\mathrm{b}^{(n-1)} = M_{n-1} \dots M_2 M_1 \mathrm{b}$. Следовательно, $A = M_1^{-1} M_2^{-1} \dots M_{n-1}^{-1} A^{(n-1)}$. При этом

$$M_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \ M_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \mu_{n2} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \dots$$

Обозначим $U = A^{(n-1)}$, $L = M_1^{-1} M_2^{-1} \dots M_{n-1}^{-1}$.

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{31} & \mu_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_{n1} & \mu_{n2} & \mu_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}.$$

Теорема. Если все главные миноры матрицы A отличны от нуля, то существуют единственные нижняя треугольная матрица L с 1 на диагонали и верхняя треугольная матрица U такие, что $A = LU$.

Метод квадратного корня/метод Холецкого

A — симметричная положительно определенная. Приводим к виду $A = LL^T$, L — нижняя треугольная, $l_{ii} > 0$. Вычисляем элементы матрицы LL^T, приравниваем к элементам A, решаем систему, получаем:

$$
\begin{aligned}
& l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \\
& l_{i1} = a_{i1}/l_{11}, \; i = 2, 3, \ldots, n \\
& l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}, \\
& l_{i2} = (a_{i2} - l_{i1} l_{21})/l_{22}, \; i = 3, 4, \ldots, n \\
& \ldots \\
& l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - l_{k1}^2 - l_{k2}^2 - \ldots - l_{k,k-1}^2}, \\
& l_{ik} = (a_{ik} - l_{i1} l_{k1} - l_{i2} l_{k2} - \ldots - l_{i,k-1} l_{k,k-1})/l_{kk}, \; i = k+1, \ldots, n, \\
& \ldots \\
& l_{nn} = \sqrt{a_{nn} - l_{n1}^2 - l_{n2}^2 - \ldots - l_{n,n-1}^2}.
\end{aligned}
$$

Оценки количества операций

LU-разложение — $\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$.

Метод Холецкого — $n^3/3 + O(n^2)$.

Рассмотренные методы — последовательность некоторых элементарных преобразований матрицы, которые задаются некоторой матрицей P, так что применение преобразование = умножению слева на P.

При таком процессе может увеличиваться число обусловленности.

Хочется преобразовывать так, чтобы cond не росло.
$\Rightarrow$ использовать унитарные (в вещественном случае — ортогональные, т.е. $P^T = P^{-1}$) матрицы преобразований P.
В таком случае будем получать разложение $A = QR$, где $Q = P_1^{-1} P_2^{-1} \dots P_m^{-1}$ — ортогональная, R — верхняя треугольная.

Метод вращений

Элементарное (плоское) вращение задается матрицей ($i < j$)

$$T_{ij} = \begin{pmatrix}
1 & & & & & & & & & & \\
 & \ddots & & & & & & & & & \\
 & & 1 & & & & & & & & \\
 & & & \cos\varphi & & & & -\sin\varphi & & & \\
 & & & & 1 & & & & & & \\
 & & & & & \ddots & & & & & \\
 & & & & & & 1 & & & & \\
 & & & \sin\varphi & & & & \cos\varphi & & & \\
 & & & & & & & & 1 & & \\
 & & & & & & & & & \ddots & \\
 & & & & & & & & & & 1
\end{pmatrix}$$

T_{ij} — ортогональная матрица; изменяет только i-ю и j-ю координаты векторов.
Пусть $z = (z_1, \ldots, z_n)^T$ — вектор. Тогда, если

$$\cos\varphi = \frac{z_i}{\sqrt{z_i^2 + z_j^2}}, \quad \sin\varphi = -\frac{z_j}{\sqrt{z_i^2 + z_j^2}},$$

то

$$T_{ij}z = (z_1, \ldots, z_{i-1}, \sqrt{z_i^2 + z_j^2}, z_{i+1} \ldots, z_{j-1}, 0, z_{j+1}, \ldots, z_n)^T = \|z\|\tilde{z}.$$

Т.е. последовательность поворотов $T_{12}, T_{13}, \ldots, T_{1n}$ приведет вектор к виду $\tilde{z} = (\|z\|, 0, \ldots, 0)^T$.
Применение же такой последовательности поворотов к матрице — к виду, где в 1-м столбце только 1-й элемент не равен 0. В итоге:

$$\Rightarrow Q = \underbrace{T_{12}^{-1} T_{13}^{-1} \ldots T_{1n}^{-1}} \cdot \underbrace{T_{23}^{-1} T_{24}^{-1} \ldots T_{2n}^{-1}} \cdot \ldots \cdot \underbrace{T_{n-2,n-1}^{-1} T_{n-2,n}^{-1}} \cdot \underbrace{T_{n-1,n}^{-1}}.$$

Количество операций при решении линейной системы методом вращений: $2n^3 + O(n^2)$.

Теорема. Всякая невырожденная матрица A может быть представлена в виде $A = QR$, где Q — ортогональная, а R — верхняя треугольная с положительными элементами на главной диагонали. Это разложение единственно.

Метод отражений

Преобразование = отражение относительно гиперплоскости, проходящей через начало координат и задаваемой вектором нормали w.

Матрица отражения: $U = U(\mathrm{w}) = E - 2\mathrm{w}\mathrm{w}^H$.
Самосопряженная. Унитарная.

Если e: $\|\mathrm{e}\| = 1 \Rightarrow \forall \mathrm{y}\ \exists \mathrm{w} : \|\mathrm{w}\| = 1\ \&\ U(\mathrm{w})\mathrm{y} = \|\mathrm{y}\|\mathrm{e}$.
Положим $\mathrm{w} = \pm\dfrac{\mathrm{y} - \|\mathrm{y}\|\mathrm{e}}{\|\mathrm{y} - \|\mathrm{y}\|\mathrm{e}\|}$.

Алгоритм метода отражений для системы $A\mathrm{x} = \mathrm{b}$

Обозначим $a_1 = (a_{11}, \ldots, a_{n1})^T$. Существует $\mathrm{w}^{(1)} = \pm \dfrac{a_1 - \|a_1\| e_1}{\|a_1 - \|a_1\| e_1\|}$ такой, что $U(\mathrm{w}^{(1)}) a_1 = \|a_1\| e_1$. Умножаем систему слева на

$$U(\mathrm{w}^{(1)}) = E - 2\mathrm{w}^{(1)} \cdot (\mathrm{w}^{(1)})^H,$$

получаем: $A^{(1)}\mathrm{x} = \mathrm{b}^{(1)}$,

$$A^{(1)} = U(\mathrm{w}^{(1)})A = \begin{pmatrix} \|a_1\| & a_{12}^{(1)} & \ldots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \ldots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \ldots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}, \; \mathrm{b}^{(1)} = U(\mathrm{w}^{(1)})\mathrm{b}.$$

Далее работаем с подматрицей $\left(a_{ij}^{(1)}\right)_{i,j=2,\ldots,n}$
На промежуточном шаге домножаем слева преобразованную матрицу системы и правую часть на матрицу $U_i = \begin{pmatrix} E_{i-1} & 0 \\ 0 & U(\mathrm{w}^{(i)}) \end{pmatrix}$, $U(\mathrm{w}^{(i)})$ — матрица отражения размера $(n-i+1) \times (n-i+1)$.

И как в методе вращений приходим к виду $A = QR$.
Количество операций для решения системы равно $\frac{4}{3}n^3 + O(n^2)$.

Задание 2

Реализовать два метода решения СЛАУ: «LU» и «QR».

- Проверить ответ.
- Для матрицы A и матриц получившегося разложения вычислить числа обусловленности (см. задание 1); сравнить.
- Протестировать на разных матрицах: хорошо обусловленных, [очень] плохо обусловленных.

Литература к заданию 2

Упорядочены по уменьшению полезности, с моей точки зрения.

К.Ю.Богачев, Практикум на ЭВМ. Методы решения линейных систем и нахождения собственных значений. (LU и QR разложения)

Н.Н.Калиткин, Е.А.Альшина, Численные методы. Книга 1. (про QR разложения)

И.С.Березин, Н.П.Жидков, Методы вычислений, том 2. (про метод квадратного корня)