Лабораторная работа №1 по курсу "Методы вычислений"

"Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений"

Выполнили: студенты группы ФН2-52Б Пащенко Николай и Попов Артем.

Варианты 15 и 17.

Контрольные вопросы

1) Каковы условия применимсоти метода Гаусса без выбора и с выбором ведущего элемента?

Выбор главного элемента при решении СЛАУ методом Гаусса означает, что на k-ом шаге выбирается максимальный элемент в текущем столбце (частичный выбор) или и в текущем столбце и в текущей строке (полный выбор).

Условие применимости метода Гаусса с выбором главного элемента – это невырожденность исходной матрицы A, т.к. всегда найдется элемент в текущем столбце, не равный 0 (иначе определитель матрицы равен 0, что противоречит условию). Условием применимости метода Гаусса без выбора главного элемента является то, что на k-ом шаге элемент a_{kk} не равняется 0. Однако это не следует из условия $\det A \neq 0$.

Для того, чтобы на k-ом шаге прямого хода метода Гаусса без выбора главного значения все элементы $a_{ii}, i = 1, ..., k$ матрицы $A^{(k)}$ не равнялись 0 необходимо и достаточно, чтобы все главные угловые миноры исходной матрицы A были ненулевыми.

◄ (Необходимость)

Рассмотрим матрицу $A^{(k)}$ на k-ом шаге:

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2k} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{kk} & \dots & a_{kn} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Рассмотрим угловые миноры этой матрицы:

$$\triangle_1 = a_{11}$$
$$\triangle_2 = a_{11} \cdot a_{12}$$
$$\dots$$
$$\triangle_k = a_{11} \cdot a_{12} \cdot \ldots \cdot a_{kk}$$
$$\dots$$

По условию, ни один из них не равен 0. В основе метода Гаусса лежит сложение и вычитание строк, умноженных на число. Но по свойству определителя матрицы, эти действия не меняют его величину. Следовательно, главные угловые миноры исходной матрицы A также не равны 0.

(Достаточность)
Пусть все угловые миноры исходной матрицы A ненулевые. Приводя матрицу к верхнетреугольному виду, будем производить сложение и вычитание строк, умноженных на число. По свойству определителя, эти действия не изменят его значение. Следовательно, все угловые миноры матрицы $A^{(k)}$ на k-ом шаге, равные произведению элементов на главной дигонали, также будут не равны 0. Следовательно, ни один элемент $a_{ii}, i = 1, ..., k$ не равен 0, что и требовалось доказать. ▶

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.

◀ Доказательство будем проводить "от противного". Допустим, что на k-ом шаге прямого хода метода Гаусса с выбором главного элемента в $k+1$-ом столбце все элементы не выше главной диагонали равны нулю:

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} & a_{1k+1} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2k} & a_{2k+1} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & a_{kk} & a_{kk+1} & \dots & a_{kn} \\ \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Элементарные преобразования строк (сложение и вычитание строк, умноженных на число) не меняют величину определителя. Следовательно, определитель матрицы $A^{(k)}$ и определитель исходной матрицы A равны. Разложим определитель матрицы $A^{(k)}$ последовательно по столбцам, начиная с 1-го:

$$\triangle_A = \triangle_{A^{(k)}} = a_{11} \cdot a_{22} \cdot \ldots \cdot a_{kk} \cdot \begin{vmatrix} 0 & \ldots & \ldots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

Получили определитель с нулевым столбцом, по свойству определителя матрицы, он равен 0. Получили противоречие, следовательно, наше предположение неверно и при выборе главного элемента в столбце среди элементов, лежащих не выше главной диагонали, всегда найдется хотя бы один элемент, отличный от нуля. ▶

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.

Пусть требуется реализовать метод Гаусса с полным выбором ведущего элемента для решения СЛАУ с матрицей A, при котором на k-ом шаге прямого хода выбирается максимальный элемент среди $a_{ij},\ i,j = k, k+1, ..., n$ и становится на позицию (k,k). Для того, чтобы восстановить первоначальный порядок неизвестных, создадим два целочисленных массива N_{line} и N_{column}, в которых изначально хранится порядок следования строк и столбцов исходной матрицы соответственно. Т.е. изначально там хранятся числа по порядку от 0 до $N-1$.

Теперь, меняя местами i и j строки (столбцы) матрицы A, нужно просто поменять местами i и j элемент массива N_{line} (N_{column}). Изменение вектора b правой части осуществляется перестановкой элементов в массиве N_{line}. После изменения порядка следования строк и/или столбцов матрицы A, обращение к элементу a_{ij} производится через элементы массивов N_{line} и/или N_{column} следующим образом: $A[N_{line}[i]][N_{column}[j]]$.

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

В методе QR-разложения ортогональную матрицу вращений T можно посчитать с помощью коэффициентов $c_{ij} = \frac{a_{ii}}{\sqrt{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}}$ и $s_{ij} = \frac{a_{ji}}{\sqrt{a_{ii}^2 + a_{ji}^2}}$, преобразовав в циклах единичную матрицу. И с помощью c_{ij} и s_{ji} можно получить верхнетреугольную матрицу R.

Для того, чтобы оценить количество арифметических операций необходимо все циклы заменить суммированием, а каждую строку заменить количеством операций в ней: умножения, деления, возведения в квадрат и извлечения квадртного корня.

Весь метод QR-разложения требует внешнего цикла по $i = 0, ..., N-1$. Далее в цикле от $j = i+1$ до $N-1$ для вычисления коэффициентов c_{ij} и s_{ji} необходимо выполнить 5 операций (2 раза возведение в квадрат, 1 раз извлечение корня, 2 раза деление). При вычислении матрицы T требуется 4 арифметических операции в цикле уже от $k = 0$ до $N-1$, а для изменения матрицы R также нужно 4 операции, но цикл проходит от $k = i$ до $N-1$, так как нет необходимости считать вычисленные ранее элементы матрицы. В итоге получаем:

$$\sum_{i=0}^{N-1}(N-i-1) + \sum_{i=0}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N-1} 4(N-j-1) + \sum_{i=0}^{N-1}\sum_{j=i+1}^{N-1} 4(N-j) = \frac{4N^3}{3}$$

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?

Число $M_A = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|$ называется числом обусловленности матрицы A. Умножение или деление матрицы на число не меняет ее число обусловленности. Обусловленность матрицы – это устойчивость ее решения к малым погрешностям входных данных. Матрица называется хорошо обусловленной, если малым пограшеностям входных данных отвечают малые погрешности решения, и плохо обусловленной, если возможны сильные изменения решения при малых возмущениях входных данных.

Величина определителя не влияет на число обусловленности. Это становится понятно, если рассмотреть следующие матрицы:

$$A = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} \frac{1}{\varepsilon} & 0 \\ 0 & \frac{1}{\varepsilon} \end{pmatrix}, \quad \varepsilon \to 0.$$

Тогда определитель матрицы A будет стремиться к 0, а определитель матрицы B будет стремиться к бесконечности. Однако, если домножить матрицу A на $\frac{1}{\varepsilon}$, а матрицу B на ε, то получим, что число обусловленности матриц A и B одинаковы и равны 1.

Выбор нормы не влияет на оценку числа обусловленности, так как нормы матриц эквивалентны.

6) Как упрощается оценка числа обусловленности, если матрица явлеяется:
а) диагональной;
б) симметричной;
в) ортогональной;
г) положительно определенной;
д) треугольной?

а) У диагональной матрицына главной диагонали стоят собственные значения. Следовательно, число обусловленности будет больше либо равно отношению модуля максимального числа на главной диагонали к минимальному числу на главной диагонали., т.е. $M_A \geqslant \frac{|\lambda_{max}|}{|\lambda_{min}|}$.

б) Обратная к симметричной матрице также симметрична. Облегчает поиск обратной матрицы, т.е. можно найти только диагональные элементы и элементы, лежащие ниже (выше) главной диагонали. Для симметричной матрицы кубическая и октаэдрическая нормы совпадают.

в) Для ортогональной матрицы верно равенство $A^{-1} = A^T$, поэтому достаточно транспонировать исходную матрицу, чтобы найти обратную.

г) Матрица A положительно определена, тогда существует матрица B такая, что $A = B \cdot B$. Следовательно, число обусловленности матрицы A, $M_A \leqslant M_B \cdot M_B$. Т.е. число обусловленности положительно определенной матрицы ограничено сверху.

д) Собственные значения треугольной матрицы, так же как и в случае диагональной, равны элементам на главной диагонали. Поэтому оценку можно провести аналогично пункту (а).

7*) Применимо ли понятие числа обусловленности к выроденным матрицам? Обратная матрица по определению существует только для невырожденной матрицы. Следовательно, число обусловленности не определено для вырожденных матриц.

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

Метод Гаусса целесообразно использовать, когда матрица A и столбец b изменяются. Так как в данном случае количество ариметический операция для произвольной матрицы A размера $n \times n$ будет порядка $\frac{n^3}{3}$. А в методе QR-разложения требуется больше вычислительных затрат. Метод QR-разложения целесообразно использовать, когда матрица A остается неизменной, а столбец правой части меняется. С помощью метода вращений можно один раз вычислить ортогональную матрицу Q и верхнетреугольную матрицу R, а далее использовать только обратных ход метода Гаусса для различных векторов правой части.

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

Объединить прямой и обратный ход метода Гаусса можно следующим образом: органзиовать цикл таким способом, чтобы "обнулялись"не только диагональные элементы, но и элементы над главной диагональю. Т.е. привести матрицу к диагональному виду. Тогда столбец правой части и будет решением.

Недостаток объединения в одну процедуру заключается в том. что в таком случае не получится использовать обратный ход метода Гаусса для решения СЛАУ с помощоью QR-разложения.

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

Распишем подробнее каждую норму в отдельности для вектора x.

$$\|x\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i|$$

В пространстве векторов R^3 множество $\|x\|_1 \leqslant 1$ представляет собой октаэдр. Т.е.

сумма векторов по трем направлениям не привышает единицы, следовательно, от осей "отсекается"треугольник.

$$\|x\|_2 =$$

В пространстве векторов R^3 множество $\|x\| \leqslant 1$ представляет собой шар радиуса 1.

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|$$

В пространстве векторов R^3 множество $\|x\|_\infty \leqslant 1$ представляет собой куб со стороной 2.