Metody numeryczne

Wykład 3

Michał Łaskawski

Wprowadzenie

Jednym z podstawowych zadań algebry liniowej jest rozwiązywanie układów równań liniowych:

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \dots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{i1}x_1 & + & a_{i2}x_2 & + & & + & a_{in}x_n & = & b_i \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{m1}x_1 & + & a_{m2}x_2 & + & \dots & + & a_{mn}x_n & = & b_n \end{array} \tag{1}$$

W postaci macierzowej:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \tag{2}$$

Gdzie:

$\mathbf{A}$ jest macierzą $m \times n$ znanych współczynników,

$\mathbf{b}$ jest wektorem m znanych wyrazów wolnych,

$\mathbf{X}$ jest wektorem n niewiadomych.

Definicje

Zgodny układ równań liniowych

Układ równań liniowych nazywa się zgodnym, gdy ma przynajmniej jedno rozwiązanie, może on być układem:

- oznaczonym, gdy ma dokładnie jedno rozwiązanie,
- nieoznaczonym, gdy ma nieskończenie wiele rozwiązań.

Niejednorodny układ równań liniowych

Niejednorodny układ równań liniowych to układ, który spełnia warunek:

$$\sum_{i=1}^{m} b_i^2 > 0 \tag{3}$$

gdzie: b_i jest i tym wyrazem wektora wyrazów wolnych $\mathbf{b}$.

Rząd macierzy (rank)

Jest to maksymalna liczba liniowo niezależnych wektorów tworzących kolumny lub wiersze.

Warunki rozwiązania

Twierdzenie Kroneckera – Capellego

Układ równań posiada rozwiązanie wtedy i tylko wtedy, gdy:

$$\operatorname{rank} \mathbf{A} = \operatorname{rank} \mathbf{B} = r \tag{3}$$

gdzie: $\mathbf{B}$ jest macierzą rozszerzoną powstałą z macierzy $\mathbf{A}$ poprzez dołączenie do niej wektora $\mathbf{b}$ jako $n + 1$ kolumny. Przy czym:

- istnieje dokładnie jedno rozwiązanie, gdy $r = n$,
- układ ma nieskończenie wiele rozwiązań zależnych od $e = n - r$ parametrów, gdy $r < n$,
- układ jest sprzeczny, gdy $\operatorname{rank} \mathbf{A} < \operatorname{rank} \mathbf{B}$.

Wspólny rząd macierzy $\mathbf{A}$ oraz $\mathbf{B}$ nazywa się rzędem układu.

Metoda dokładne

Metody dokładne są to metody rozwiązywania liniowych układów równań, które pozwalają znaleźć dokładne rozwiązanie w ograniczonej ilości kroków elementarnych działań arytmetycznych.

Liczba tych działań zależy tylko i wyłącznie od:

- algorytmu metody,
- rzędu układu.

Wzory Cramera

Dany jest układ Cramera, który w zapisie macierzowym przyjmuje postać:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

Jeżeli macierz współczynników $\mathbf{A}$ jest macierzą nieosobliwą, to znaczy $\det \mathbf{A} \neq 0$, to istnieje macierz odwrotna $\mathbf{A}^{-1}$.

Metoda Cramera

W celu rozwiązania układu (2), obie strony równania należy pomnożyć przez $\mathbf{A}^{-1}$:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b} \tag{5}$$

gdzie: $\mathbf{A}^{-1} = \frac{\mathbf{A}^D}{\det \mathbf{A}}$, natomiast $\mathbf{A}^D$ jest macierzą dopełnień algebraicznych (macierzą dołączoną):

$$\mathbf{A}^D = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} & \cdots & \mathbf{A}_{1n} \\ \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} & \cdots & \mathbf{A}_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{k1} & \mathbf{A}_{k2} & \cdots & \mathbf{A}_{kn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{n1} & \mathbf{A}_{n2} & \cdots & \mathbf{A}_{nn} \end{bmatrix} \tag{6}$$

Elementy $\mathbf{A}_{ij}$ są dopełnieniami algebraicznymi elementów a_{ij}, czyli wartościami wyznaczników $n-1$ stopnia, powstałych z wyznacznika $\det \mathbf{A}$ poprzez skreślenie i-tego wiersza i j-tej kolumny dodatkowo pomnożonymi przez wyraz $(-1)^{i+j}$.

Metoda Cramera

Rozwiązanie układu (2) jest następujące:

$$\mathbf{x} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \mathbf{A}^D \mathbf{b} \tag{7}$$

Należy zauważyć, że w iloczynie:

$$A^D b = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{11} b_1 & \mathbf{A}_{12} b_2 & \cdots & \mathbf{A}_{1n} b_n \\ \mathbf{A}_{21} b_1 & \mathbf{A}_{22} b_2 & \cdots & \mathbf{A}_{2n} b_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{k1} b_1 & \mathbf{A}_{k2} b_2 & \cdots & \mathbf{A}_{kn} b_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{A}_{n1} b_1 & \mathbf{A}_{n2} b_2 & \cdots & \mathbf{A}_{nn} b_n \end{bmatrix} \tag{8}$$

dowolny k-ty wiersz jest równy wartości wyznacznika $\det \mathbf{D}_k$.

$\det \mathbf{D}_k$ powstaje z wyznacznika macierzy $\mathbf{A}$ poprzez zastąpienie w nim k-tej kolumny, kolumną wyrazów wolnych.

Metoda Cramera

Ostatecznie, rozwiązanie układu (2) przyjmuje postać:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_k \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \begin{bmatrix} D_1 \\ D_2 \\ \vdots \\ D_k \\ \vdots \\ D_n \end{bmatrix} \tag{9}$$

Z równania (9), wynikają wzory Cramera:

$$x_k = \frac{\mathbf{D}_k}{\det A} \tag{10}$$

gdzie: $k = 1, 2, \ldots, n$.

Metoda Cramera

Implementacja w języku Python:

```
import numpy as np

A = np.array([ [10.0, 40.0, 70.0], [20.0, 50.0, 80.0], [30.0, 60.0, 80.0] ])
b = np.array([ [300.0], [360.0], [390.0] ])
x = np.array( [[0.0], [0.0], [0.0]] )

detA = np.linalg.det(A)
if detA == 0:
    print("Brak rozwiazan")
else:
    for k in range(0, b.shape[0]):
        M = A.copy()
        M[:, k] = b.squeeze().copy()
        x[k] = np.linalg.det(M)/detA
```

Wyznaczniki

Dla macierzy A

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \tag{11}$$

ogólny wzór na wyliczanie wartości wyznacznika macierzy $\mathbf{A}$ ma postać:

$$\det \mathbf{A} = \sum_{i=1}^{n} (-1)^{i+j} a_{ij} \mathbf{A}_{ij} \tag{12}$$

gdzie: $\mathbf{A}_{ij}$ jest wyznacznikiem macierzy powstałej z macierzy $\mathbf{A}$ poprzez skreślenie i-tego wiersza i j-tej kolumny.

Zależność (12) ma niewielkie znaczenie praktyczne. Konieczne jest wykonanie n! operacji mnożenia.

Macierze trójkątne

Macierz trójkątna dolna (lewa)

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{k1} & l_{k2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \quad (13)$$

Macierz trójkątna górna (prawa)

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{kn} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} \quad (14)$$

Uwaga:

Sumy, iloczyny i odwrotności macierzy trójkątnych tego samego rodzaju (górnej lub dolnej), są macierzami trójkątnymi.

Wyznaczniki macierzy (13) oraz (14) są iloczynami elementów leżących na głównej przekątnej:

$$\det \mathbf{L} = l_{11} l_{22} \ldots l_{nn} \quad (15)$$

$$\det \mathbf{U} = u_{11} u_{22} \ldots u_{nn} \quad (16)$$

Układy z macierzami trójkątnymi

Jeżeli macierz układu (2): $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ jest macierzą trójkątną, to taki układ można łatwo rozwiązać.

Przyjmując, że $\mathbf{A}$ jest macierzą trójkątną górną i jest nieosobliwa (wszystkie elementy na głównej przekątnej są różne od 0), to układ równań przyjmuje postać:

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ & & a_{22}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ & & & & a_{n-1\,n-1}x_{n-1} & + & a_{n-1\,n}x_n & = & b_{n-1} \\ & & & & & & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array} \qquad (17)$$

Uwaga:

Składowa x_n może być natychmiast wyznaczona z ostatniego równania układu (17).

Podstawiając uzyskany wynik do przedostatniego równania można wyznaczyć składową x_{n-1}.

Procedurę można kontynuować, aż do uzyskania składowej x_1.

Układy z macierzami trójkątnymi

Przykład:

Dany jest układ 3 rzędu w postaci:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 \\ a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 \\ a_{33}x_3 &= b_3 \end{aligned}$$

W pierwszym kroku z trzeciego równania wyznaczana jest wartość niewiadomej x_3.

$$x_3 = \frac{b_3}{a_{33}}$$

Dalej do drugiego równania podstawiana jest wyznaczona wartość x_3 i wyznaczana jest wartość x_2.

$$x_2 = \frac{b_2 - a_{23}x_3}{a_{22}}$$

Następnie procedura jest powtarzana dla równania pierwszego.

$$x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 + a_{13}x_3}{a_{11}}$$

Układy z macierzami trójkątnymi

Dla układu z macierzą trójkątną górną, rozwiązanie można opisać ogólnymi zależnościami:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}$$
$$x_i = \frac{b_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_k}{a_{ii}} \qquad (18)$$

dla $i = n-1, n-2, \ldots 1$.

Dla układu z macierzą trójkątną dolną:

$$x_n = \frac{b_1}{a_{11}}$$
$$x_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{n-1} a_{ik} x_k}{a_{ii}} \qquad (19)$$

dla $i = 2, 3, \ldots n$.

Powyższa procedura nazywa się metodą wstecznego podstawiania.

Układy z macierzami trójkątnymi

Koszt obliczeń według zależności (18) lub (19) wymaga M operacji mnożenia i D operacji dzielenia:

$$M = \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n \qquad D = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$$

Koszt ten jest niewiele większy od kosztu mnożenia wektora przez macierz trójkątną.

Wiele metod numerycznego rozwiązywania układów równań liniowych polega na:

- sprowadzeniu układu do postaci trójkątnej
- a następnie wykorzystaniu zależności (18) lub (19).

Metoda eliminacji Gaussa

Cel: Sprowadzić układ do postaci trójkątnej.

Dla ułatwienia przyjęto układ 3 rzędu.

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 &+ a_{12}x_2 &+ a_{13}x_3 &= b_1 \\ a_{21}x_1 &+ a_{22}x_2 &+ a_{23}x_3 &= b_2 \\ a_{31}x_1 &+ a_{32}x_2 &+ a_{33}x_3 &= b_3 \end{aligned}$$

Odejmując od drugiego wiersza, pierwszy pomnożony przez a_{21}/a_{11} a od trzeciego wiersza, pierwszy pomnożony przez a_{31}/a_{11} uzyskuje się:

$$\begin{aligned} a_{11}^0x_1 &+ a_{12}^0x_2 &+ a_{13}^0x_3 &= b_1^0 \\ & a_{22}^1x_2 &+ a_{23}^1x_3 &= b_2^1 \\ & a_{32}^1x_2 &+ a_{33}^1x_3 &= b_3^1 \end{aligned}$$

gdzie: $a_{ij}^0 = a_{ij}$, $b_i^0 = b$ dla $i, j = 1,2,3$ oraz:

$$a_{ij}^1 = a_{ij}^0 - \frac{a_{i1}^0}{a_{11}^0}a_{1j}^0 \qquad b_j^1 = b_i^0 - \frac{a_{i1}^0}{a_{11}^0}b_1^0 \qquad i, j = 2,3$$

W ten sposób z równań 2 oraz 3 wyeliminowana została zmienna x_1.

Metoda eliminacji Gaussa

Eliminacja zmiennej x_2 z trzeciego równania, realizowana jest poprzez odjęcie od równania trzeciego, równania drugiego pomnożonego przez a_{32}^1/a_{22}^1. Wtedy uzyskuje się układ w postaci:

$$\begin{aligned} a_{11}^0 x_1 &+ a_{12}^0 x_2 &+ a_{13}^0 x_3 &= b_1^0 \\ & a_{22}^1 x_2 &+ a_{23}^1 x_3 &= b_2^1 \\ & & a_{33}^2 x_3 &= b_3^2 \end{aligned}$$

gdzie:

$$a_{ij}^2 = a_{ij}^1 - \frac{a_{i2}^1}{a_{22}^1} a_{2j}^1 \qquad b_j^2 = b_i^2 - \frac{a_{i2}^1}{a_{22}^1} b_1^1 \qquad i,j = 3$$

W ten sposób z równania 3 wyeliminowana została zmienna x_2.

Metoda eliminacji Gaussa

Uogólnione zależności umożliwiające wyznaczenie współczynników macierzy i wyrazów wolnych układu równań liniowych dowolnego rzędu (n-tego) są następujące:

$$a_{ij}^{k} = a_{ij}^{k-1} - \frac{a_{ik}^{k-1}}{a_{kk}^{k-1}} a_{kj}^{k-1} \qquad b_{i}^{k} = b_{i}^{k-1} - \frac{a_{ik}^{k-1}}{a_{kk}^{k-1}} b_{k}^{k-1} \tag{20}$$

gdzie: $i, j = k+1, k+2, \ldots n$

Stosując powyższe zależności można sprowadzić układ równań do postaci z macierzą trójkątną górną.

Dalej, układ równań można rozwiązać stosując metodę wstecznego podstawiania.

$$x_i = \frac{b_i^{i-1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{i-1} x_j}{a_{ii}^{i-1}} \tag{21}$$

dla $i = n, n-1, \ldots 1$.

Metoda eliminacji Gaussa

Całkowity nakład obliczeniowy metody eliminacji Gaussa

$$M = \frac{1}{3}n^3 + n^2 + \frac{1}{3} \qquad D = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 + \frac{5}{6}n$$

Wymagana liczba operacji jest mniejsza od liczby operacji niezbędnych do wykonania dla metody Cramera.

Metoda eliminacji Gaussa

Implementacja w języku Python:

```
import numpy as np

A = np.array([ [10.0, 40.0, 70.0], [20.0, 50.0, 80.0], [30.0, 60.0, 80.0] ])
b = np.array([ [300.0], [360.0], [390.0] ])
x = np.array( [[0.0], [0.0], [0.0]] )

n = b.shape[0]

for k in range(0, n-1):
    for i in range(k+1, n):
        L = A[i,k] / A[k,k]
        for j in range(k+1, n):
            A[i,j] = A[i,j] - L * A[k,j]
        b[i] = b[i] - L * b[k]

x = b.copy()
for i in range(n-1, -1, -1):
    S = 0.0
    for j in range(i+1, n):
        S = S + A[i,j] * x[j]
    x[i] = (x[i] - S) / A[i,i]
```

$$i, j = k+1, k+2, \ldots n$$

$$a_{ij}^{k} = a_{ij}^{k-1} - \frac{a_{ik}^{k-1}}{a_{kk}^{k-1}} a_{kj}^{k-1}$$

$$b_{i}^{k} = b_{i}^{k-1} - \frac{a_{ik}^{k-1}}{a_{kk}^{k-1}} b_{k}^{k-1}$$

$$i = n, n-1, \ldots 1$$

$$x_i = \frac{b_i^{i-1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{i-1} x_j}{a_{ii}^{i-1}}$$