Обчислювальні методи в сучасних наукових дослідженнях

Модуль №1 «Обчислювальні методи в алгебрі та аналізі»

Тема 2.1.2. Прямі методи розв'язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь. Метод Гауса та його матрична інтерпретація, метод квадратних коренів. Обчислення оберненої матриці та визначника. Методи прогонки та їхня складність. Обчислювальна похибка та обумовленість систем лінійних алгебраїчних рівнянь.

Знову розглядаємо рівняння

$$Ax = y,$$

де $x \in \mathcal{X}, y \in \mathcal{Y}, A: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$.

Якщо $\mathcal{X}$= $\mathcal{Y} = \mathbb{R}^n \vee \mathbb{C}^n$, а оператор $A: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$ – лінійний, то ми маємо систему лінійних алгебраїчних рівнянь.

Традиційно систему лінійних алгебраїчних рівнянь записується у вигляді

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = y_2 \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = y_n \end{cases},$$

або у матричному вигляді

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Матриця

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

називається невиродженою, якщо її визначник

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} \neq 0.$$

В такому разі система рівнянь має єдиний розв'язок

$$x = A^{-1}y.$$

В разі, коли розмірність системи є надто великою, її розв'язання може бути складною проблемою. Додаткові складнощі можуть виникати при близьких до нуля значеннях визначника системи.

Для розв'язання систем лінійних рівнянь традиційно використовують дві групи чисельних методів:

- **точні (**метод Гауса, метод Гауса-Халецького, метод Гауса-Жордана, метод Крамера та ін.);
- **наближені (**метод послідовних ітерацій, метод Гауса-Зейделя, метод векторів зміщень).

До точних методів відносять методи, які дозволяють отримати точний розв'язок системи (2.1) за відповідну кількість операцій перетворення без урахування похибок заокруглення.

До наближених методів відносять методи, які дозволяють отримати розв'язок системи у вигляді границі послідовності векторів, яка збігається до точного розв'язку системи.

1 Йога́нн Карл Фрі̂дріх Га́ус (Johann Carl Friedrich Gauß, 30.04.1777 — 23.02.1855)

Метод Гауса розв'язування системи лінійних алгебраїчних рівнянь полягає в послідовному виключенні змінних і перетворенні системи рівнянь

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = y_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = y_2 \\ \cdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = y_n \end{cases}$$

до трикутного (східчастого) вигляду

$$\begin{cases} c_{11}x_1 + c_{12}x_2 + \cdots + c_{1n}x_n = d_1 \\ c_{22}x_2 + \cdots + c_{2n}x_n = d_2 \\ \cdots \\ c_{nn}x_n = d_n \end{cases}$$

$c_{kk} = 1, k = 1.2. \dots, n.$

Припустимо, що в системі коефіцієнт при першому елементі відмінний від нуля $a_{11} \neq 0$. Якщо ця умова не виконується, то на перше місце переносимо рівняння, яке її задовільняє.

За допомогою першого рівняння виключимо x_1 із решти рівнянь. Для цього ділять перший рядок на a_{11}, позначимо це

$$a_{1k}^1 = \frac{a_{1k}}{a_{11}}, b_k^1 = \frac{b_k}{a_{11}}.$$

Далі від другого рядка віднімаємо перший рядок, помножений на a_{21}; від третього перший рядок, помножений на a_{31}; і так далі до останнього рядка. Дістанемо таблицю коефіцієнтів:

$$\begin{vmatrix} x_1 & x_2 & \dots & x_n & 1 \\ a_{11}^1 & a_{12}^1 & \dots & a_{1n}^1 & b_1^1 \\ 0 & a_{22}^1 & \cdots & a_{2n}^1 & b_2^1 \\ \dots & \dots & \cdots & \dots & \dots \\ 0 & a_{n2}^1 & \cdots & a_{nn}^1 & b_n^1 \end{vmatrix}$$

Для невідомих $x_2, \dots, x_n$ маємо систему $n-1$ рівнянь. Виконуючи, як і раніше, виключимо x_2 з усіх рівнянь, починаючи з третього. Для цього спочатку поділимо другий рядок на a_{22}^1. Якщо коефіцієнт $a_{22}^1 = 0$, то переставимо рівняння так, щоб виконувалася умова $a_{22}^1 \neq 0$. Позначивши

$$a_{2k}^2 = \frac{a_{2k}^1}{a_{22}^1}, b_k^2 = \frac{b_k^1}{a_{22}^1}.$$

,

від третього рядка віднімемо другий рядок, помножений на a_{23}^2; від четвертого рядка віднімемо другий рядок, помножений на a_{24}^2 і т.д.

Продовжуючи процес виключення невідомих отримаємо таблицю коефіцієнтів при невідомих, яка має вигляд верхньої трикутної матриці. Всі елементи на головній діагоналі рівні одиниці.

Перехід від першої системи рівнянь до останньої називається **прямим ходом методу Гауса. Обернений хід методу Гауса** починається з останньої системи рівнянь. Її розв'язують з кінця до початку. З останнього рівняння знаходять x_n. Підставивши це значення в передостаннє – знаходять x_{n-1}і т.д. З першого рівняння знаходять x_1. Якщо система рівнянь з N невідомими має єдиний розв'язок, то ця система завжди може бути перетворена до трикутного вигляду.

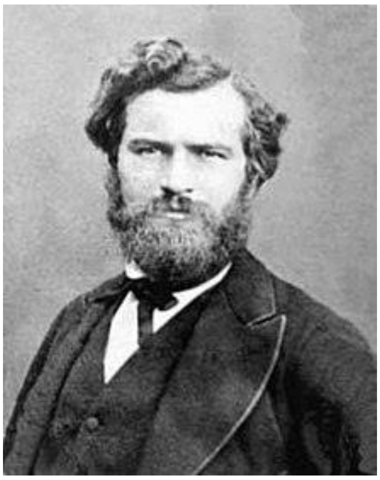
Алгоритм **методу Гауса-Холескі** включає також прямий і зворотній хід. Кінцевою метою прямого ходу є отримання системи лінійних рівнянь, яка еквівалентна заданій, з верхньою трикутною матрицею коефіцієнтів. Для цього матрицю коефіцієнтів початкової системи рівнянь A розбивають на дві трикутні:

$$A = C \cdot D,$$

де матриця *C* **–** нижня трикутна матриця; *D* **–** верхня трикутна матриця з одиничною головною діагоналлю.

2 Андре-Луї Холескі (André-Louis Cholesky, 15.10.**1875-31.08.1918) - французький офіцер і математик**

Особливістю **метода Гауса-Жордана** є перетворення системи до еквівалентної з одиничною матрицею коефіцієнтів.



3 Марі̂ Енмо́н Камі̂ль Жорда́н (Marie Ennemond Camille Jordan, 50.01.1838 — 22.01.1922) — французький математик

Метод Крамера. Розв’язок системи лінійних рівнянь записується у вигляді:

$$x_i = \frac{1}{\Delta}\begin{vmatrix} a_{11} & \dots & a_{1,i-1} & y_1 & a_{1,i+1} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \dots & a_{2,i-1} & y_2 & a_{2,i+1} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n-1,1} & \dots & a_{n-1,i-1} & y_{n-1} & a_{n-1,i+1} & \dots & a_{n-1,n} \\ a_{n1} & \dots & a_{n,i-1} & y_n & a_{n,i+1} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix},$$

де Δ - визначник системи (i-й стовпчик матриці системи замінюється стовпчиком вільних членів).

4 Габріель Крамер (Gabriel Cramer, 31.07.1704 — 4.01.1752) — швейцарський математик

Метод квадратного кореня. Якщо в системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$Ax = y$$

матриця A є невиродженою ($\det A \neq 0$) та симетричною, то ми можемо розкласти її на добуток матриць

$$A = LDL^T,$$

де L - нижня трикутна матриця, L^T – транспонована до неї матриця, D – діагональна матриця. Отримаємо систему:

$$LDL^T x = y.$$

Розв'язок отримаємо, послідовно розв'язавши дві трикутні системи:

$$LDz = y$$

та

$$L^T x = z.$$

Метод прогонки, також відомий як алгоритм Томаса, дозволяє розв'язувати системи лінійних алгебраїчних рівнянь з тридіагональною матрицею, і є спрощенням методу Гауса для таких обмежень. Працює за лінійний час.

Число обумовленості - величина, що характеризує точність розв'язку, отриманого чисельним методом. Якщо точність велика, то дані **добре обумовлені**, інакше вони **погано обумовлені**.

Для квадратної матриці A це

$$\kappa(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|,$$

де $\|A\|$ – це норма матриці A. Число обумовленості характеризує *стійкість* систем лінійних алгебраїчних рівнянь до обчислювальної похибки. Тобто, чим більше число обумовленості матриці системи (чим *гірше обумовлена* система лінійних алгебраїчних рівнянь), тим менш точними будуть розв’язки отримані за допомогою чисельних методів, та навпаки.