Lineáris egyenletrendszerek

A fizika numerikus módszerei I.

mf1n1a06- mf1n2a06

Csabai István

Gauss-elimináció

- Oldjuk meg a következő lineáris egyenletet: $Ax = b$

$$a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1$$

$$a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2$$

$$\ldots$$

$$a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n$$

- Nem változik a megoldás, ha:
  - Két sort felcserélünk
  - Két oszlopot felcserélünk (pontosabban az együttható mátrix oszlopait és az ismeretlen vektor megfelelő sorait)
  - Egy sor t helyettesítünk a sor és más sorok lineáris kombinációjával

Gauss-elimináció

- Tegyük fel, hogy $a_{11} \neq 0$
- Vonjuk ki minden $i \geq 2$ sorból az első sor $\frac{a_{i1}}{a_{11}}$ - szeresét:
- Azt kapjuk, hogy:

$$
\begin{gathered}
a'_{11}x_1 + a'_{12}x_2 + \ldots + a'_{1n}x_n = b'_1 \\
0 + a'_{22}x_2 + \ldots + a'_{2n}x_n = b'_2 \\
\ldots \\
0 + a'_{n2}x_2 + \ldots + a'_{nn}x_n = b'_n
\end{gathered}
$$

- A fenti átalakítás nagyságrendileg N^2 művelet végrehajtását igényelte

Gauss-elimináció

- Vonjuk ki minden $i != 2$ sorból a második sor $\frac{a'_{i2}}{a'_{22}}$ - szeresét:
- Azt kapjuk, hogy:

$$
\begin{gathered}
a''_{11}x_1 + 0 + \ldots + a''_{1n}x_n = b''_1 \\
0 + a''_{22}x_2 + \ldots + a''_{2n}x_n = b''_2 \\
\ldots \\
0 + 0 + \ldots + a''_{nn}x_n = b''_n
\end{gathered}
$$

Gauss-elimináció

- Hasonlóan folytatva minden sorral, végül a következő mátrixhoz és jobb oldalhoz jutunk:

$$\begin{pmatrix} a_{11}^* & 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & b_1^* \\ 0 & a_{22}^* & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 & b_2^* \\ \vdots & & \ddots & & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{rr}^* & 0 & \dots & 0 & b_r^* \\ \vdots & & & & & & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & & & & & a_{nn}^* & b_n^* \end{pmatrix}$$

- Végül minden sort leosztva a diagonális elemekkel, az átalakított jobboldal helyén megkapjuk az ismeretleneket.
- Tehát N-szer végeztünk el, lépésenként N^2 műveletet, tehát nagyságrendileg N^3 műveletet kellett összesen végrehajtani.

Gauss-elimináció

- Összefoglalva az átalakításokat:

$$Ax = b \Rightarrow Ix = b^*$$

- Ha az ismeretlenek helyére egy X mátrixot, a jobb oldal helyett pedig eredetileg egy egységmátrixot írunk, akkor:

$$AX = I \Rightarrow IX = A^{-1}$$

- Vagyis a Gauss-elimináció segítségével a mátrix inverze is megkapható

- Mátrix-invertálás – lineáris egyenletrendszer megoldás műveletigénye (futási idő):

$$T \sim N^3$$

Problémák

- Túlhatározott egyenletrendszer (M>N), vagy szinguláris mátrix – nincs megoldás
  - Kereshetjük azt a megoldást amire az $\| Ax - b \|$ minimális
- Alulhatározott mátrix (M<N) – több megoldás
  - A megoldások alterében kereshetjük azt, amire $\| x \|$ minimális
- Matematikailag egzaktul megoldható probléma a numerikus kerekítések miatt
  - Nincs megoldás
  - Pontatlan, hibás eredmény

Lineáris egyenletrendszerek

- Sok probléma megoldásánál fellép
- Nagyon sok numerikus feladat (paraméter-becslés, függvényillesztés, interpoláció, bizonyos differenciál egyenletek …) közvetve erre vezet
- Általánosan N^3 műveletet igényel a megoldás
- Speciális mátrixok (sáv-, Toeplitz-, ritka-), speciális módszerek ($\sim N^3$, $\sim N^2$, $\sim N$ műveletigénnyel)
- A numerikus módszerek egyik fő kihívása: gyorsabb, pontosabb algoritmusok tervezése, a kerekítési hibák halmozódásának elkerülése
- Most nem vesszük részletesen: csak használjuk az Octave beépített módszerét

Megoldás invertálással és a \ operátorral

```
octave:##>A=[1, 1; 2, -3];
octave:##> b=[3 5]';
octave:##> inv(A)*b
ans =
  2.8000
  0.2000
```

```
octave:##>A\b
ans =
  2.8000 0.2000
```

Gyorsabb !!

- Ellenőrzés:

```
octave:##> A*ans
ans =
  3.0000
  5.0000
```

Szinguláris mátrix

$u + v + w = 2$
$2u + 3w = 5$
$3u + v + 4w = 6$ (a bal oldal az első két sor összege, a jobb oldal nem)

```
octave:##>A=[1 1 1
             2 0 3
             3 1 4];
octave:##>b=[ 2 5 6]';
octave:##>x=A\b;
warning: matrix singular to machine precision, rcond = 1.15648e-17
warning: attempting to find minimum norm solution
x =
0.69048
-0.11905
1.09524
octave:##>A*x
ans =
  1.6667
  4.6667
  6.3333
```

Alulhatározott mátrix

$$u + v + w = 2$$
$$2u + 3w = 5$$

```
octave:##> A=[1,1,1;2,0,3];

octave:##> b=[2,5]‘;

octave:##> x=A\b
ans =
   0.785714
   0.071429
   1.142857

octave:##> A*x
ans =
   2.0000
   5.0000
```

Rosszul kondicionált mátrix

$$\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1.01\end{bmatrix}\begin{pmatrix}1\\ 1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}2\\ 2.01\end{pmatrix}$$

```
octave:##>M=[1 1; 1 1.01]; b=[2; 2.01];
octave:##>x=M\b
x =
  1.00000
  1.00000
```

- Kis perturbáció

```
octave:##>M(1,2)=1.005;
octave:##>x=M\b
x =
  -0.0100000
   2.0000000
```

- Nagyobb mátrixoknál könnyebben előfordul!

Rosszul kondicionált mátrix

- Hilbert-féle mátrix

$$H_{ij} = \frac{1}{i+j-1}.$$

- Pl.:

$$H = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} & \frac{1}{8} \\ \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} & \frac{1}{8} & \frac{1}{9} \end{bmatrix}.$$

```
octave:##>A=hilb(20);
octave-3.0.0.exe:36> x=linspace(1,20,20)';
octave-3.0.0.exe:37> b=A*x;
octave-3.0.0.exe:38> A\b
warning: matrix singular to machine precision, rcond =
   1.264e-020
warning: attempting to find minimum norm solution
warning: dgelsd: rank deficient 20x20 matrix, rank = 14
ans =
1.00000,2.00001,2.99976,4.00369,4.97135,6.12263,6.71047,
8.32126,8.99804,9.73197,10.97731,12.24056,13.13674,13.83668,
14.77220,16.00726,17.25326,18.12140,18.67825,20.11717
```

Futási idő mérése Octave-ban

- `tic` : stopper indítása
- `toc` : stopper leállítása

```
octave:##> tic; x=A\b; toc
  ans = 0.00046100
```

- Feladat: lineáris egyenlet megoldás sebességének skálázása N függvényében

inv(A) és A\b összehasonlítása

```
octave##> n=3000;
octave##> A=toeplitz(n:-1:1);
octave##> b=linspace(1,2,n)';
octave##> tic; inv(A)*b; toc
Elapsed time is 65 seconds.
octave##> tic; A\b; toc
Elapsed time is 23 seconds.
```

Adatok beolvasása/kiíratása

```
octave:##> save myMatrix A
bash-3.00$ cat myMatrix
# Created by Octave 2.1.57, Tue Mar 06
  11:10:01 2007 CET
  <csabai@evghumgmt.colbud>
# name: A
# type: matrix
# rows: 2
# columns: 2
 1 2
 5 4
```

Adatok beolvasása/kiíratása

```
octave:14> clear all
octave:15> A
error: `A' undefined near line 15 column
  1
octave:15> load myMatrix
octave:16> A
A =
   1   2
   5   4
```

Adatok beolvasása/kiíratása

```
bash-3.00$ cat matrix2.dat
3 5 7
1 2 3
2 7 1

octave:17> B = load matrix2.dat
B =
   3   5   7
   1   2   3
   2   7   1
```

- További formátumok: Octave Manual 16. fejezet

Olvasnivaló

- Stoyan G. MATLAB könyv, 54-67.o., 72-86.o.
- Stoyan G. Numerikus matematika, 41-46. o.
- P.J.G. Long: Octave Tutorial, 38-44. o.