Lineáris egyenletrendszerek: bevezetés

Kormányos Andor

Komplex Rendszerek Fizikája Tanszék

2022 november 15.

M darab egyenlet N változóval, az a_{ij} és b_j értékek ismertek:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1N}x_N &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2N}x_N &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{M1}x_1 + a_{M2}x_2 + ... + a_{MN}x_N &= b_M \end{aligned}$$

Felírhatjuk mátrix alakban is:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Cél: az x_i ismeretlenek (**x** vektor) meghatározása.

$M = N$ esetén

- Egyértelmű megoldást kapunk, kivéve ha a mátrix szinguláris: $det(\mathbf{A}) = 0$
- ha a mátrix szinguláris:
  - vagy nincs megoldás
  - vagy végtelen sok megoldás van

Mikor szinguláris egy mátrix?

- van olyan sor, ami más sorok lineárkombinációjaként előáll
- ugyanakkor ez úgy is látható, hogy van olyan oszlop, ami más oszlopok lineárkombinációjaként előáll

Numerikusan szinguláris mátrixok

A számítógép a valós számokat véges precizitással ábrázolja, emiatt kerekítési hibák adódnak.

$N \gg 1 \Rightarrow$ az egyenletrendszer megoldása sok műveletet igényel

- a kerekítési hibák összeadódnak
- a program lefut, de a végeredmény hibás lesz
- a kapott $\mathbf{x}$ megoldás visszahelyettesítésével lehet ellenőrizni a hibát
- a kerekítési hibák miatt a számolás során előfordulhat 0-val osztás $\Rightarrow$ a mátrix *numerikusan szinguláris*
- ilyen esetekben NaN vagy Infinity lesz az eredmény

Numerikusan szinguláris mátrixok

A számítógép a valós számokat véges precizitással ábrázolja, emiatt kerekítési hibák adódnak.

$N \gg 1 \Rightarrow$ az egyenletrendszer megoldása sok műveletet igényel

- a kerekítési hibák összeadódnak
- a program lefut, de a végeredmény hibás lesz
- a kapott $\mathbf{x}$ megoldás visszahelyettesítésével lehet ellenőrizni a hibát
- a kerekítési hibák miatt a számolás során előfordulhat 0-val osztás $\Rightarrow$ a mátrix *numerikusan szinguláris*
- ilyen esetekben NaN vagy Infinity lesz az eredmény

Speciális algoritmus alkalmazása nélkül

- néhány 10 változós egyenlet általában elég könnyen megoldható
- néhány 100 egyenlethez duplapontosságú aritmetika kell: `double` típusú változók használata
- 1000 egyenlet fölött már biztosan jelentkeznek a problémák

Számításigény

- a memóriaigény N^2-tel skálázik
- a számításigény N^3-bel skálázik

Speciális alakú mátrixok esetében van gyorsabb megoldás.

- tridiagonális (ld. FiznumII: spline interpoláció)
- Vandermonde-típusú (ld. FiznumII: interpolált polinom együtthatói)

Alulhatározott egyenletrendszerek

Ha $M < N$, vagy $M = N$, de az egyenletrendszer degenerált (kevesebb egyenlet, mint ismeretlen): az egyenletrendszer *alulhatározott*

- egyáltalán nincsen megoldás, vagy
- a megoldás egy egész altér:
  $\mathbf{x}_p$ egy lehetséges megoldás, és ehhez jön még $N - M$ vektor tetszőleges lineárkombinációja

Túlhatározott egyenletrendszerek

Ha $M > N$ (több egyenlet mint ismeretlen) akkor az egyenletrendszer *túlhatározott*

- általában nincsen megoldás, de
- van értelme egy lehetséges legjobb megoldásról beszélni
- ez az az $\mathbf{x}$, ami az alábbi minimumot megvalósítja

$$\min_{\mathbf{x}} \sum_i \left(b_i - \sum_j a_{ij} x_j \right)^2 = \min_{\mathbf{x}} (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})^2$$

Programcsomagok lineáris egyenletek megoldására

Optimalizált programcsomagok léteznek

- LINPACK, LAPACK
- Párhuzamosított változat: ScaLAPACK
- Intel processzorokra optimalizált: MKL

Támogatják speciális mátrixok optimális tárolását is, pl.:

- Szimmetrikus mátrix, háromszög-mátrix
- Sávmátrixok
- Ritka mátrixok (majdnem minden elem 0)

Programcsomagok lineáris egyenletek megoldására

Optimalizált programcsomagok léteznek

- LINPACK, LAPACK
- Párhuzamosított változat: ScaLAPACK
- Intel processzorokra optimalizált: MKL

Támogatják speciális mátrixok optimális tárolását is, pl.:

- Szimmetrikus mátrix, háromszög-mátrix
- Sávmátrixok
- Ritka mátrixok (majdnem minden elem 0)

Singular value decomposition

- (közel) szinguláris, túlhatározott, alulhatározott egyenletrendszer esetén is hasznos lehet az szinguláris érték szerinti felbontás (angol: SVD) módszer