

LUENTO 2 21.9.2005

[Haa02] luku 3

Lineaariset yhtälöryhmät

- ← tavalliset differentiaaliyhtälösystemit
- ← osittaisdifferentiaaliyhtälöt
- ← epälineaariset yhtälöt
- ← optimointi

- tiheät ja harvat yhtälöryhmät
- suorat menetelmät (Gaussin eliminointi)
- epäsuorat menetelmät (iteratiiviset)
- suuret yhtälöryhmät (esim. FEM, miljoonia muuttujia) → tehokkuus

Esimerkki: yhtälöryhmä → kerroinmatriisi A , $Ax = b$, $x=?$

Gaussin eliminointi

- manipuloi kerroinmatriisia A siten että lävistäjän alapuoliset alkiot $=0 \rightarrow$ yläkolmiomatriisi U
- ratkaise muuttujien arvot yläkolmiomatriisin alimmalta riviltä aloittaen

Algoritmi 3.2.1 (Gaussin eliminointi ja takaisinsijoitus)

```
for  $k = 1, 2, \dots, n - 1$  (käydään kaikki matriisin sarakkeet läpi)
  for  $i = k + 1, \dots, n$  (nollataan lävistäjän alapuoliset alkiot)
     $r = a(i, k) / a(k, k)$ 
     $a(i, k + 1 : n) = a(i, k + 1 : n) - r * a(k, k + 1 : n)$ 
     $b(i) = b(i) - r * b(k)$  (päivitetään oikean puolen vektori)
  end
end
```

(Takaisinsijoitus:)

```
 $x(n) = b(n) / a(n, n)$  (luetaan viimeisimmän muuttujan arvo)
for  $k = n - 1, n - 2, \dots, 1$  (muut muuttujat)
   $s = a(k, k + 1 : n) * x(k + 1 : n)$ 
   $x(k) = (b(k) - s) / a(k, k)$ 
end
```

LU (Lower – Upper) hajotelma

$Ax = b \rightarrow A = LU$ siten, että

- L on alakolmiomatriisi jonka diagonaali-alkiot ovat ykkösiä
- U on yläkolmiomatriisi jonka alkiot ovat samat kuin kerroinmatriisilla A Gaussin eliminoinnin jälkeen

Esimerkki

LU hajotelmaa käytetään ratkaistaessa peräkkäisiä lineaarisia yhtälöryhmiä, joilla on sama kerroinmatriisi A mutta eri tulosvektori b

Algoritmi 3.2.2 (Yhtälöryhmän ratkaiseminen LU-hajotelmalla)

- 1: Ratkaise z yhtälöstä $Lz = b$.
- 2: Ratkaise x yhtälöstä $Ux = z$.

$$Ax = L(Ux) = Lz = b$$

LU-hajotelman muodostaminen = Gaussin eliminointi $\approx n^3$ operaatiota
Askelten 1 ja 2 ratkaiseminen $\approx n^2$ operaatiota

Käänteismatriisi A^{-1} : $Ax = b \rightarrow x = A^{-1}b$ ($A^{-1}A = AA^{-1} = I$)

3.3 Yhtälöryhmän ratkaisemisen teoriaa

Tässä luvussa kerromme milloin lineaarisella yhtälöryhmällä on yksikäsitteinen ratkaisu. Lisäksi käsittelemme saatavan ratkaisun tarkkuutta.

Matriisi A on *säännöllinen*, jos lineaarisella yhtälöryhmällä $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ on yksikäsitteinen ratkaisu. Tämä toteutuu, jos A on neliömatriisi ja jokin seuraavista yhtäpitävistä ehdoista on voimassa:

- Matriisilla A on olemassa käänteismatriisi A^{-1} .
- A :n determinantti $|A| \neq 0$.
- A :n pystyvektorit (sarakkeet) ovat lineaarisesti riippumattomat.
- A :n vaakavektorit (rivit) ovat lineaarisesti riippumattomat.
- A :n *säännöllisyysaste* eli *rangi* on sama kuin matriisin dimensio (säännöllisyysaste on maksimaalinen lineaarisesti riippumattomien pysty- tai vaakavektorien lukumäärä).
- Yhtälöryhmän $A\mathbf{x} = \mathbf{0}$ ainoa ratkaisu on $\mathbf{x} = \mathbf{0}$.

Muussa tapauksessa matriisia kutsutaan singulaariseksi, jolloin yhtälöryhmällä on äärettömän monta ratkaisua tai sillä ei ole ratkaisua ollenkaan. Jos tehtäväsi kerroinmatriisi on singulaarinen, on alkuperäinen tehtävä luultavasti väärin määritelty tai kyseessä on ohjelmointivirhe.

Jos matriisissa A on enemmän rivejä kuin sarakkeita, yhtälöryhmää sanotaan *ylideterminoiduksi* ja sillä on ratkaisu pienimmän neliösumman mielessä. Vastaavasti jos matriisissa on enemmän sarakkeita kuin rivejä, yhtälöryhmää kutsutaan *alideterminoiduksi*.

Eräs tärkeä käsite yhtälöryhmien ratkaisussa on matriisin definiittisyys. Matriisi A on positiivisesti definiitti, jos pätee

$$\mathbf{x}^T A \mathbf{x} > 0 \text{ kaikilla } \mathbf{x} \neq \mathbf{0}. \quad (3.2)$$

Positiivisesti definiittien matriisien lävistäjäalkiot ovat kaikki positiivisia. Jos sekä matriisi A että sen transpoosi A^T ovat lävistäjävaltaisia ja matriisin A lävistäjäalkiot ovat positiivisia, matriisi on positiivisesti definiitti. Positiivisesti definiittien matriisien ei kuitenkaan tarvitse olla lävistäjävaltaisia.

Yhtälöryhmät, joissa kerroinmatriisi on positiivisesti definiitti, ovat stabiileja ratkaista. Kuten aikaisemmin todettiin, ratkaistaessa niitä Gaussin eliminoinnilla ei tarvita tuenta.

Ominaisarvo-ongelmat [Haa02 luku 9]

Monilla tieteenaloilla on tärkeitä ongelmia, jotka voidaan muotoilla ominaisarvotehtäviksi. Seuraavassa listassa on muutamia esimerkkejä:

- Monimutkaisen rakenteen, esimerkiksi laivan tai lentokoneen, ominaisvärähtelyjen ja niiden taajuuksien määrittäminen.
- Radiovastaanottimien ja -lähettimien halutaan toimivan resonanssitaajuuksilla; sähköverkoissa resonansseja yritetään välttää.
- Kvanttifysiikassa ja kvanttikemiassa systeemejä kuvataan Schrödingerin yhtälöllä, jonka ominaisarvot ovat eri tilojen energiat.
- Kemiaallisten reaktioiden simuloinnissa halutaan määrittää olosuhteet, joissa reaktiot tapahtuvat jaksollisesti.
- Makrotalousmalleissa niin sanottujen tasapainotettujen hinnoittelustrategioiden ja tuotantorakenteiden määrittäminen johtaa ominaisarvotekniikkaan.
- Markovin ketjuilla kuvattavien systeemien, kuten jonotus- ja tietokonesysteemien, aikakäyttäytymisen tutkiminen.

Määritelmä

Kompleksiluku λ on $n \times n$ neliömatriisin A ominaisarvo, jos on olemassa vektori $x \neq 0$ jolle pätee

$$Ax = \lambda x \quad \Leftrightarrow \quad (A - \lambda I)x = 0 \quad I = \text{yksikkömatriisi}$$

x = ominaisvektori, arvot $\{\lambda\}$ muodostavat A :n spektrin

Ominaisarvot toteuttavat yhtälön $\det(A - \lambda I) = 0$, joten ne voidaan ratkaista tämän ns. karakteristisen polynomin nollakohdista.

Esimerkki: CO₂ –molekyylin ominaisvärähtelyt (=kytketyt harmoniset värähtelijät)

Taulukko 9.1: *Ominaisarvojen λ_i ominaisuuksia eräille matriisityypeille.*

<i>Matriisi A</i>	<i>Ominaisarvot λ_i</i>
ylä- tai alakolmiomatriisi	ominaisarvot ovat A :n lävistäjäalkiot
hermiittinen	ominaisarvot ovat reaaliset
positiivisesti definiitti	ominaisarvot ovat positiivisia
positiivisesti semidefiniitti	ominaisarvot ovat ei-negatiivisia