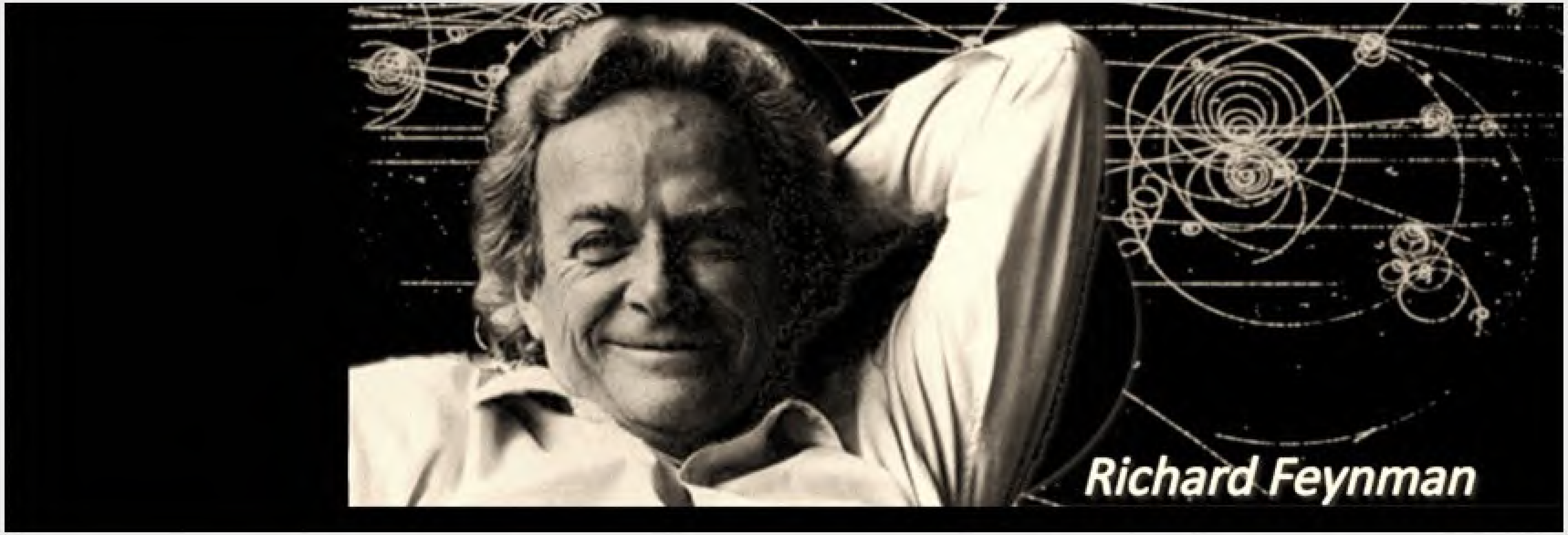
Numerical Calculations

Faculty of Physics – Kharazmi University

Dr. Faramarz Kanjouri

Spring 2022



اگر همواره مانند گذشته بیندیشید، همیشه همان چیزهایی را به‌دست می‌آورید که تا کنون کسب کرده‌اید

فاینمن

درس ششم

حل دستگاه معادلات خطی

Solving Systems of Linear Equations

دانشگاه خوارزمی

$$
\begin{aligned}
a_{00}x_0 &+ a_{01}x_1 + \ldots + a_{0,n-1}x_{n-1} = b_0 \\
a_{10}x_0 &+ a_{11}x_1 + \ldots + a_{1,n-1}x_{n-1} = b_1 \\
a_{20}x_0 &+ a_{21}x_1 + \ldots + a_{2,n-1}x_{n-1} = b_2 \\
\vdots & \qquad \qquad \vdots \qquad \vdots \\
a_{n-1,0}x_0 &+ a_{n-1,1}x_1 + \ldots + a_{n-1,n-1}x_{n-1} = b_n
\end{aligned}
$$

$$
\begin{pmatrix} a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,n-1} \\ a_{10} & a_{11} & \cdots & a_{1,n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,1} & \cdots & a_{n-1,n-1} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ \vdots \\ x_{n-1} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_{n-1} \end{pmatrix}
$$

روش‌های حل:

الف) روش‌های مستقیم

ب) روش‌های تکراری

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

دانشگاه خوارزمی

با یک مسئله‌ی ساده شروع می‌کنیم. فرض کنید یک ماتریس پایین مثلثی داریم

$$\boxed{\mathbf{Lx} = \mathbf{b}}$$

$$
\begin{aligned}
&L_{00}x_0 = b_0 \\
&L_{10}x_0 + L_{11}x_1 = b_1 \\
&L_{20}x_0 + L_{21}x_1 + L_{20}x_2 = b_2
\end{aligned}
$$

$$
\begin{pmatrix} L_{00} & 0 & 0 \\ L_{10} & L_{11} & 0 \\ L_{20} & L_{21} & L_{22} \end{pmatrix}
\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}
$$

$$x_0 = \frac{b_0}{L_{00}}$$

$$x_1 = \frac{b_1 - L_{10}x_0}{L_{11}}$$

$$x_2 = \frac{b_2 - L_{20}x_0 - L_{21}x_1}{L_{22}}$$

forward substitution

دانشگاه خوارزمی

برای یک ماتریس پایین مثلثی $n\times n$ می‌توان نوشت:

$$x_i = \left(b_i - \sum_{j=0}^{i-1} L_{ij} x_j \right) \frac{1}{L_{ii}}, \quad i = 0, 1, \cdots, n-1$$

forward substitution

در عبارت فوق وقتی $i=0$ عبارت حاصل جمع شامل هیچ جمله‌ای نمی‌شود. به ازای $i=1$ یک جمله دارد و به ازای $i=2$ دو جمله و الی آخر.

دانشگاه خوارزمی

حال فرض کنید یک ماتریس بالا مثلثی داریم

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{b}$$

$$\begin{aligned} U_{00}x_0 + U_{01}x_1 + U_{02}x_2 &= b_0 \\ U_{11}x_1 + U_{12}x_2 &= b_1 \\ U_{22}x_2 &= b_2 \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} U_{00} & U_{01} & U_{02} \\ 0 & U_{11} & U_{12} \\ 0 & 0 & U_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_0 \\ b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

$$x_2 = \frac{b_2}{U_{22}}$$

$$x_1 = \frac{b_1 - U_{12}x_2}{U_{11}}$$

$$x_0 = \frac{b_0 - U_{01}x_1 - U_{02}x_2}{U_{00}}$$

back substitution

دانشگاه خوارزمی

برای یک ماتریس بالا مثلثی $n\times n$ می‌توان نوشت:

$$x_i = \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n-1} U_{ij} x_j \right) \frac{1}{U_{ii}}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1, 0$$

back substitution

ارزیابی تعداد عملیات در محاسبه‌ی مجهولات

$$\boxed{x_i = \left(b_i - \sum_{j=0}^{i-1} L_{ij} x_j \right) \frac{1}{L_{ii}}, \quad i = 0, 1, \cdots, n-1}$$

برای هر x_i یک تقسیم، به تعداد i ضرب و به تعداد i تفریق انجام می‌شود.

تعدا کل جمع‌ها (تفریق‌ها) $\displaystyle\sum_{i=0}^{n-1} i = \frac{n^2 - n}{2}$

تعدا کل ضرب‌ها (تقسیم‌ها) $\displaystyle n + \sum_{i=0}^{n-1} i = \frac{n^2 + n}{2}$

تعدا کل عمل‌ها: n^2

Gaussian Elimination

در روش حذفی گوس، با استفاده از اَعمال سطری مقدماتی، ماتریس ضرایب را به شکل بالا مثلثی در می‌آوریم

$$\boxed{\mathbf{Ax = b} \quad \rightarrow \quad \mathbf{Ux = d}}$$

دستگاه جدید را با جاگذاری پس‌رو حل می کنیم

elementary row operations

۱ - می‌توان یک سطر (معادله) را در یک عدد ضرب کرد (ضرب یک سطر ماتریس افزوده در یک عدد) (دترمینان A در آن عدد ضرب می‌شود)

۲ - می‌توان جای دو سطر (معادله) را با هم عوض کرد. (تعویض دو سطر با هم در ماتریس افزوده) (تغییر علامت دترمینان A)

۳ - می‌توان یک سطر (معادله) را در یک عدد ضرب و با سطر (معادله‌ی) دیگر جمع کرد. (ضرب یک سطر در یک عدد و جمع با سطر دیگر در ماتریس افزوده) (دترمینان A تغییر نمی‌کند)

دانشگاه خوارزمی

elementary row operations

۱ - می‌توان یک سطر (معادله) را در یک عدد ضرب کرد (ضرب یک سطر ماتریس افزوده در یک عدد) (دترمینان A در آن عدد ضرب می‌شود)

$$\begin{aligned} x_0 + 5x_1 &= 8 \\ 2x_0 + x_1 &= 7 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 3x_0 + 15x_1 &= 24 \\ 2x_0 + x_1 &= 7 \end{aligned}$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 5 & 8 \\ 2 & 1 & 7 \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 3 & 15 & 24 \\ 2 & 1 & 7 \end{array}\right)$$

elementary row operations

۲ - می‌توان جای‌دو سطر (معادله) را با هم عوض کرد. (تعویض دو سطر با هم در ماتریس افزوده) (تغییر علامت دترمینان A)

$$\begin{aligned} x_0 + 5x_1 &= 8 \\ 2x_0 + x_1 &= 7 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 2x_0 + x_1 &= 7 \\ x_0 + 5x_1 &= 8 \end{aligned}$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 5 & 8 \\ 2 & 1 & 7 \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 2 & 1 & 7 \\ 1 & 5 & 8 \end{array}\right)$$

دانشگاه خوارزمی

elementary row operations

۳ - می‌توان یک سطر (معادله) را در یک عدد ضرب و با سطر (معادله‌ی) دیگر جمع کرد. (ضرب یک سطر در یک عدد و جمع با سطر دیگر در ماتریس افزوده) (دترمینان A تغییر نمی‌کند)

$$\begin{aligned} x_0 + 5x_1 &= 8 \\ 2x_0 + x_1 &= 7 \end{aligned}$$

$$2x_0 + 10x_1 = 16$$

$$\begin{aligned} x_0 + 5x_1 &= 8 \\ 4x_0 + 11x_1 &= 23 \end{aligned}$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 5 & 8 \\ 2 & 1 & 7 \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 5 & 8 \\ 4 & 11 & 23 \end{array}\right)$$

دانشگاه خوارزمی

$$\mathbf{S}=\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)=\left(\begin{array}{cccc|c} a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,n-1} & b_0 \\ a_{10} & a_{11} & \cdots & a_{1,n-1} & b_1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,1} & \cdots & a_{n-1,n-1} & b_{n-1} \end{array}\right)=\left(\begin{array}{cccc|c} a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,n-1} & a_{0,n} \\ a_{10} & a_{11} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,1} & \cdots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \end{array}\right)_{n\times n-1}$$

دستگاه اصلی را به شکل $\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)^{(0)}$ نام‌گذاری می‌کنیم

$$\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)^{(0)}=\left(\begin{array}{cccc|c} a_{00}^{(0)} & a_{01}^{(0)} & \cdots & a_{0,n-1}^{(0)} & a_{0,n}^{(0)} \\ a_{10}^{(0)} & a_{11}^{(0)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(0)} & a_{1,n}^{(0)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,0}^{(0)} & a_{n-1,1}^{(0)} & \cdots & a_{n-1,n-1}^{(0)} & a_{n-1,n}^{(0)} \end{array}\right)$$

تلاش می‌کنیم که آن را به ماتریس بالامثلثی تبدیل کنیم

گام صفرم $(k=0)$:

در ستون اول، به جز عنصر اول، بقیه‌ی عناصر را صفر می‌کنیم. برای این کار سطر اول را در $m_{i0}=\dfrac{a_{i0}}{a_{00}}$ ضرب و سپس از سطر iام کم می‌کنیم. (در این مرحله a_{00} عنصر محور است. که مخالف صفر فرض شده است. بعدا در مورد شرایطی که عنصر محور صفر باشد صحبت می‌کنیم. عناصر جدید به شکل زیر خواهند بود:

$$
\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)^{(0)}=\left(\begin{array}{cccc|c}
a_{00}^{(0)} & a_{01}^{(0)} & \cdots & a_{0,n-1}^{(0)} & a_{0,n}^{(0)}\\
a_{10}^{(0)} & a_{11}^{(0)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(0)} & a_{1,n}^{(0)}\\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\
a_{n-1,0}^{(0)} & a_{n-1,1}^{(0)} & \cdots & a_{n-1,n-1}^{(0)} & a_{n-1,n}^{(0)}
\end{array}\right)
$$

$$\boxed{a_{ij}^{(1)}=a_{ij}^{(0)}-m_{i0}\times a_{0j}^{(0)}}\quad \boxed{i=1,2,\cdots,n-1}\quad \boxed{j=1,2,\cdots,n}$$

$$
\boxed{\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)^{(1)}=\left(\begin{array}{cccc|c}
a_{00}^{(0)} & a_{01}^{(0)} & \cdots & a_{0,n-1}^{(0)} & a_{0,n}^{(0)}\\
0 & a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1,n}^{(1)}\\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\
0 & a_{n-1,1}^{(1)} & \cdots & a_{n-1,n-1}^{(1)} & a_{n-1,n}^{(1)}
\end{array}\right)}
$$

دانشگاه خوارزمی

گام یکم $(k=1)$:

در ستون دوم، به جز عنصر دوم، بقیه‌ی عناصر را صفر می‌کنیم. برای این کار سطر دوم را در $m_{i1}=\dfrac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$ ضرب و سپس از سطر i ام کم می‌کنیم. (در این مرحله $a_{11}^{(1)}\neq 0$ عنصر محور است). عناصر جدید به شکل زیر خواهند بود:

$$\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)^{(1)}=\left(\begin{array}{cccc|c} a_{00}^{(0)} & a_{01}^{(0)} & \cdots & a_{0,n-1}^{(0)} & a_{0,n}^{(0)} \\ 0 & a_{11}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1,n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & a_{n-1,1}^{(1)} & \cdots & a_{n-1,n-1}^{(1)} & a_{n-1,n}^{(1)} \end{array}\right)$$

$$a_{ij}^{(2)}=a_{ij}^{(1)}-m_{i1}\times a_{1j}^{(1)} \qquad i=2,\cdots,n-1 \qquad j=2,\cdots,n$$

$$\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)^{(2)}=\left(\begin{array}{ccccc|c} a_{00}^{(0)} & a_{01}^{(0)} & a_{02}^{(0)} & \cdots & a_{0,n-1}^{(0)} & a_{0,n}^{(0)} \\ 0 & a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1,n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2,n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n-1,2}^{(2)} & & a_{n-1,n-1}^{(2)} & a_{n-1,n}^{(2)} \end{array}\right)$$

دانشگاه خوارزمی

گام k ام :

$$m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \qquad i = k, k+1, \cdots, n-1$$

$$\boxed{a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} \times a_{kj}^{(k)}} \quad \boxed{i = k+1, \cdots, n-1} \quad \boxed{j = k+1, \cdots, n}$$

در مرحله‌ی $k=n$ - 2 ماتریس پایین مثلثی به شکل زیر خواهیم داشت

$$\left(\mathbf{A}\middle|\mathbf{b}\right)^{(n-1)} = \left(\begin{array}{ccccc|c} a_{00}^{(0)} & a_{01}^{(0)} & a_{02}^{(0)} & \cdots & a_{0,n-1}^{(0)} & a_{0,n}^{(0)} \\ & a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1,n-1}^{(1)} & a_{1,n}^{(1)} \\ & & a_{22}^{(2)} & \cdots & a_{2,n-1}^{(2)} & a_{2,n}^{(2)} \\ & 0 & & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & & & a_{n-1,n-1}^{(n-1)} & a_{n-1,n}^{(n-1)} \end{array}\right)$$

این دستگاه معادلات را با جاگذاری

پس‌رو حل می‌کنیم

$$\boxed{x_i = \left(a_{i,n}^{(i)} - \sum_{k=i+1}^{n-1} a_{ki}^{(i)} x_j\right)\frac{1}{a_{ii}^{(i)}}, \quad i = n-1, n-2, \cdots, 1, 0}$$

$$x_{n-1} = \frac{a_{n-1,n}^{(n-1)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-1)}} = \frac{b_{n-1}^{(n-1)}}{a_{n-1,n-1}^{(n-1)}}$$

توجه کنید که وقتی $i = n - 1$ عبارت حاصل جمع جمله‌ای ندارد و

دانشگاه خوارزمی

$$\begin{aligned} 2x_0 + x_1 + x_2 &= 8 \\ x_0 + x_1 - 2x_2 &= -2 \\ x_0 + 2x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -2 \\ 1 & 2 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ -2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{S} = \left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 8 \\ 1 & 1 & -2 & -2 \\ 1 & 2 & 1 & 2 \end{array}\right)$$

$$m_{10} = \frac{a_{10}}{a_{00}} = \frac{1}{2}$$

$\left(-m_{10}\right)$ را در سطر اول ($i=0$) ضرب می‌کنیم

$$\left(-0.5\right)\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 8 \end{array}\right) = \left(\begin{array}{ccc|c} -1 & -0.5 & -0.5 & -4 \end{array}\right)$$

نتیجه را با سطر دوم ($i=1$) جمع می‌کنیم

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 0 & 0.5 & -2.5 & -6 \end{array}\right)$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 8 \\ 0 & 0.5 & -2.5 & -6 \\ 1 & 2 & 1 & 2 \end{array}\right)$$

همین کار را برای ($i=2$) نیز انجام می‌دهیم
(سطر اول $i=0$ را در $-1/2$ ضرب می‌کنیم و با
سطر سوم $i=2$ جمع می‌کنیم)

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 8 \\ 0 & 0.5 & -2.5 & -6 \\ 0 & 1.5 & 0.5 & -2 \end{array}\right)$$

دانشگاه خوارزمی

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 8 \\ 0 & 0.5 & -2.5 & -6 \\ 0 & 1.5 & 0.5 & -2 \end{array}\right)$$

$$-3\begin{pmatrix} 0 & 0.5 & -2.5 & |-6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1.5 & 7.5 & |18 \end{pmatrix}$$

سطر دوم (i=1) را در (3-=1.5/0.5-) ضرب می کنیم

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 8 & |16 \end{pmatrix}$$

نتیجه را با سطر سوم (i=2) جمع می کنیم

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 1 & 1 & 8 \\ 0 & 0.5 & -2.5 & -6 \\ 0 & 0 & 8 & 16 \end{array}\right)$$

$$x_2 = \frac{16}{8} = 2$$

$$x_1 = \frac{-6 - (-2.5) \times x_2}{0.5} = -2$$

$$x_0 = \frac{8 - 1 \times x_1 - 1 \times x_2}{2} = 4$$

دستگاه زیر را به روش حذفی گوس حل کنید

$$
\begin{aligned}
x_0 + 5x_1 + 4x_2 &= 23\\
2x_0 + 0.5x_1 + x_2 &= 6\\
5x_0 + 2x_1 - 3x_2 &= 0
\end{aligned}
$$

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 5 & 4 & 23 \\ 0 & -9.5 & -7 & -40 \\ 0 & 0 & -6.0526 & -18.1579 \end{array}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} x_0 &= 1 \\ x_1 &= 2 \\ x_2 &= 3 \end{aligned}}$$

تعدا کل عمل‌های لازم برای به دست آوردن جواب در روش حذف گاوس ساده برابر است با:
$(n^3+3n^2-n)/3$ یعنی برای n های بزرگ تقریباً $n^3/3$ عمل.

برنامه‌ی پایتون برای حل دستگاه n معادله‌ی n مجهولی

$$\mathbf{S} = \left(\begin{array}{cccc|c} a_{00} & a_{01} & \cdots & a_{0,n-1} & a_{0,n} \\ a_{10} & a_{11} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{n-1,0} & a_{n-1,1} & \cdots & a_{n-1,n-1} & a_{n-1,n} \end{array}\right)$$

دانشگاه خوارزمی

```
import numpy as np
import sys

# (وارد کردن ابعاد ماتریس ضرایب (تعداد معادلات
n = int(input('Enter  number of equations: '))

a = np.zeros((n,n+1))

x = np.zeros(n)

#                               وارد کردن عناصر ماتریس افزوده
print('Enter Augmented Matrix Coefficients:')
for i in range(n):
   for j in range(n+1):
      a[i][j] = float(input( 'a['+str(i)+']['+ str(j)+']='))

#                               الگوریتم روش حذف گوس
for i in range(n):
   if a[i][i] == 0.0:
      sys.exit('Divide by zero detected!')
```

```
for j in range(i+1, n):
      ratio = a[j][i]/a[i][i]

      for k in range(n+1):
         a[j][k] = a[j][k] - ratio * a[i][k]

#                          جاگذاری پس‌رو
x[n-1] = a[n-1][n]/a[n-1][n-1]

for i in range(n-2,-1,-1):
   x[i] = a[i][n]

   for j in range(i+1,n):
      x[i] = x[i] - a[i][j]*x[j]

   x[i] = x[i]/a[i][i]

print('\n   eAnswr: ')
for i in range(n):
   print('X%d = %0.2f' %(i,x[i]), end = '\t')
```

دانشگاه خوارزمی

شاد و مهربان باشید