Ćwiczenia z Metod Numerycznych II A
rok akademicki 2001/2002
seria 2

Jakub Narębski Tomasz Pawłowski

9 maja 2002 roku

1 Rozwiązywanie układu równań liniowych.

1.1 Wstęp.

Układ równań liniowych wygląda następująco:

$$\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \cdots + a_{3n}x_n &= b_3 \\
&\cdots \\
a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + a_{m3}x_3 + \cdots + a_{mn}x_n &= b_m
\end{aligned} \tag{1.1.1}$$

Mamy tutaj n niewiadomych $x_j, j = 1, 2, \ldots, n$ i m równań wiążących je ze sobą. Współczynniki a_{ij}, gdzie $i = 1, 2, \ldots, m$ zaś $j = 1, 2, \ldots, n$ oraz prawe strony równań b_i, $i = 1, 2, \ldots, m$, są znanymi liczbami.

Będziemy zakładać, że $m = n$, czyli że liczba równań jest równa liczbie niewiadomych. Jeśli równania nie są liniowo zależne to równanie (1.1.1) ma dokładnie jedno rozwiązanie.

Równanie (1.1.1) można zapisać w postaci macierzowej jako

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}. \tag{1.1.2}$$

$\mathbf{A}$ jest tutaj macierzą $n \times n$ współczynników, zaś wektor (kolumnowy) $\mathbf{b}$ jest wektorem wyrazów wolnych (prawych stron),

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \ldots \\ b_n \end{bmatrix} \tag{1.1.3}$$

Uwaga: później będziemy pomijać znak mnożenia macierzowego.

1.2 Równanie z macierzą trójkątną górną.

Macierz $\mathbf{U} = (u_{ij})$ nazywamy *trójkątną górną*, jeśli wszystkie jej elementy poniżej głównej przekątnej są zerami, tj. $u_{ij} = 0$ dla $j < i$. Analogicznie macierz $\mathbf{L} = (l_{ij})$ nazywamy *trójkątną dolną* jeśli $l_{ij} = 0$ dla $j > i$.

Rozwiązanie układów równań liniowych o macierzach trójkątnych jest proste. Dla przykładu rozważmy układ o macierzy trójkątnej górnej $\mathbf{U}$

$$\begin{aligned} u_{11}x_1 + u_{12}x_2 + \cdots + u_{1n}x_n &= b_1 \\ u_{22}x_2 + \cdots + u_{2n}x_n &= b_2 \\ &\cdots \\ u_{nn}x_n &= b_n \end{aligned} \tag{1.2.1}$$

Niewiadomą x_n wyznaczmy z ostatniego równania $x_n = \dfrac{b_n}{u_{nn}}$. Znając wartości $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_{i+1}$ z i-tego równania wyznaczamy

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}} \left[b_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}x_j \right]. \tag{1.2.2}$$

1.3 Metoda eliminacji Gaussa.

Metoda eliminacji Gaussa polega na przekształceniu rozwiązywanego układu równań $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ do równoważnego układu z macierzą trójkatną górną (etap *eliminacji zmiennych*), a następnie rozwiązaniu otrzymanego równania powyższą metodą.

Oznaczmy $\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}$, $\mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}$, zaś $\mathbf{A}^{(k)}$ i $\mathbf{b}^{(k)}$ będzie oznaczać wynik k-tego kroku. W pierwszym kroku w układzie równań $\mathbf{A}^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}$ postaci

$$\begin{aligned} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(1)}x_n &= b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 + a_{22}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(1)}x_n &= b_2^{(1)} \\ &\cdots \\ a_{n1}^{(1)}x_1 + a_{n2}^{(1)}x_2 + \cdots + a_{mn}^{(1)}x_n &= b_n^{(1)} \end{aligned} \tag{1.3.1}$$

eliminujemy niewiadomą x_1 z równań $2, 3, \ldots, n$. W tym celu pierwsze równanie pomnożone przez $l_{i1} \stackrel{\text{df}}{=} a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$ należy odjąć od dalszych równań (od i-tego wiersza dla $i = 2, 3, \ldots, n$). Otrzymujemy układ równań $\mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)}$ postaci

$$\begin{aligned} a_{11}^{(2)}x_1 + a_{12}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(2)}x_n &= b_1^{(2)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(2)}x_n &= b_2^{(2)} \\ &\cdots \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + \cdots + a_{mn}^{(2)}x_n &= b_n^{(2)} \end{aligned} \tag{1.3.2}$$

Podobnie eliminujemy x_2 z równań leżących w wierszach $3, 4, \ldots, n$. Po $n-1$ eliminacjach uzyskujemy trójkątny układ równań $\mathbf{A}^{(n)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$ postaci

$$\begin{aligned} a_{11}^{(n)}x_1 + a_{12}^{(n)}x_2 + \cdots + a_{1n}^{(n)}x_n &= b_1^{(n)} \\ a_{22}^{(n)}x_2 + \cdots + a_{2n}^{(n)}x_n &= b_2^{(n)} \\ &\cdots \\ a_{mn}^{(n)}x_n &= b_n^{(n)} \end{aligned} \tag{1.3.3}$$

1.4 Rozkład LU.

1.4.1 Metoda Gaussa–Crouta.

W wielu przypadkach chcielibyśmy rozwiązywać równanie $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ dla różnych wartości $\mathbf{b}$ (np. przy znajdowaniu najmniejszej wartości własnej odwrotną metodą potęgową, albo przy znajdowaniu odwrotności macierzy). W metodzie Gaussa podczas redukcji do macierzy trójkątnej wykonywane obliczenia nie zależą od wektora prawych stron. Wystarczyło by zatem zapamiętać w jakiś sposób przekształcenia, którymi trzeba podziałać na wektor $\mathbf{b}$.

Zauważmy, że w k-tym kroku eliminacja x_k z wierszy $k+1, k+2, \ldots, n$ sprowadza się do przemnożenia obu stron układu przez macierz $L^{(k)}$ różniącą się od macierzy jednostkowej k-tą kolumną, zawierającej począwszy od wiersza $k+1$ elementy $-l_{kj}$ dla $j = k+1, k+2, \ldots, n$. Przykładowo, dla drugiego kroku dana jest ona wzorem

$$\mathbf{L}^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ 0 & 1 & & & \\ 0 & -l_{32} & 1 & & \\ \multicolumn{3}{c}{\dots\dots\dots\dots} & \ddots & \\ 0 & -l_{n2} & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \qquad l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \quad i = 3, 4, \ldots, n \tag{1.4.1}$$

Zatem $\mathbf{L}^{(n-1)}\mathbf{L}^{(n-2)} \ldots \mathbf{L}^{(2)}\mathbf{L}^{(1)}\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}^{(n)}$, zaś $\mathbf{L}^{(n-1)}\mathbf{L}^{(n-2)} \ldots \mathbf{L}^{(2)}\mathbf{L}^{(1)}\mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}^{(n)}$. Macierze $\mathbf{L}^{(k)}$ są nieosobliwe, możemy więc zapisać

$$\mathbf{A}^{(1)} = \left(\mathbf{L}^{(n-1)}\right)^{-1}\left(\mathbf{L}^{(n-2)}\right)^{-1} \ldots \left(\mathbf{L}^{(2)}\right)^{-1}\left(\mathbf{L}^{(1)}\right)^{-1}\mathbf{A}^{(n)} \overset{\text{ozn}}{=} \mathbf{L}\mathbf{A}^{(n)}, \tag{1.4.2}$$

gdzie przez $\mathbf{L}$ oznaczyliśmy iloczyn macierzy $\left(\mathbf{L}^{(k)}\right)^{-1}$. Łatwo obliczyć, że

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{22} & l_{32} & 1 & & \\ \multicolumn{3}{c}{\dots\dots\dots\dots} & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \tag{1.4.3}$$

Jeśli macierz $\mathbf{A}^{(n)}$ (końcową macierz w kroku redukcji algorytmu Gaussa) oznaczymy symbolem $\mathbf{U}$, to rozkład macierzy $\mathbf{A}$ na iloczyn można zapisać następująco

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}, \tag{1.4.4}$$

gdzie $\mathbf{L}$ jest macierzą trójkątną dolną z jedynkami na diagonali, a $\mathbf{U}$ — macierzą trójkątną górną.

Mając rozkład macierzy zadany wzorem (1.4.4) można w łatwy sposób znaleźć rozwiązanie równania $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ rozwiązując dwa równania z macierzą trójkątną:

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \qquad \mathbf{Ux} = \mathbf{y} \tag{1.4.5}$$

1.4.2 Metoda Doolittle'a.

Rozkład $\mathbf{LU}$ można uzyskać nie tylko metodą eliminacji Gaussa, ale także traktując równość $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ jako układ n^2 równań z n^2 niewiadomymi: współczynnikami macierzy $\mathbf{L}$ i $\mathbf{U}$:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{22} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \multicolumn{5}{c}{\dotfill} \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \multicolumn{5}{c}{\dotfill} \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \multicolumn{5}{c}{\dotfill} \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \qquad (1.4.6)$$

Równania te wygodnie jest rozwiązywać na przemian wierszami i kolumnami. Elementy l_{ij} $(i > j)$ i u_{ij} $(i \leq j)$ obliczamy następująco: dla $i = 1, 2, \ldots, n$ obliczamy kolejno

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \qquad \text{dla } j = i, i+1, \ldots, n \qquad (1.4.7a)$$

$$l_{ji} = \frac{1}{u_{ii}} \left(a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki} \right), \qquad \text{dla } j = i+1, i+2, \ldots, n \qquad (1.4.7b)$$

Przedstawiona metoda obliczania rozkładu $\mathbf{LU}$ nosi nazwę *metody Doolittle'a* (w niektórej literaturze *metody Crouta*). Stosując podwójną precyzję do obliczania u_{ij} i l_{ij} możemy zwiększyć dokładność obliczeń bez dodatkowego obciążania pamięci maszyny.

1.4.3 Pełny i częściowy wybór elementu podstawowego.

Zarówno metoda Gaussa jak i metoda Doolittle'a w powyższej postaci nie są niezawodne. Zawodzą, gdy na przekątnej pojawi się 0, nawet gdy układ ma rozwiązanie. Rozwiązaniem jest przestawienie wierszy (co odpowiada zamianie równań miejscami, a więc przestawieniu elementów $\mathbf{b}$) lub zarówno wierszy jak i kolumn (przestawienie kolumn odpowiada za przenumerowanie zmiennych, czyli $\mathbf{x}$). W celu zapewnienia numerycznej poprawności (małego błędu) jako element przez który dzielimy (element na przekątnej; zwany *elementem podstawowym* lub *elementem głównym*) wybieramy element największy co do modułu. Zarówno w metodzie Gaussa jak i w metodzie Doolittle'a *element podstawowy* wybieramy z tej części macierzy której jeszcze nie używaliśmy.

W metodzie *częściowego wyboru elementu podstawowego* w k-tym kroku znajdujemy wśród elementów przez który dzielilibyśmy biorąc jako następny wiersz wiersz i-ty (w metodzie Gaussa $a_{ik}^{(k)}$, w metodzie Doolittle'a $d_k \overset{\text{ozn}}{=} u_{ki} = a_{ki} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{kj} u_{ji}$ $(i = k, k+1, \ldots, n)$) element największy co do modułu — dla ustalenia uwagi niech będzie nim element w wierszu i_k–tym — a następnie przestawiamy wiersze k-ty z i_k–tym. W metodzie *pełnego wybory elementu podstawowego* maksymalny element wyszukiwany jest w całej przekształcanej części macierzy, a następnie zamienia się zarówno wiersze jak i kolumny.

Przy implementacji metody z częściowym wyborem elementu podstawowego do celów pamiętania dokonanych przestawień wierszy wprowadzamy dodatkowy wektor wskaźników przestawienia wierszy $\mathbf{p}$, zawierający na początku kolejne indeksy $\mathbf{b}$, czyli $1, 2, \ldots, n$. Przy przestawianiu wierszy macierzy przestawiamy też jego elementy. Przy rozwiązywaniu układu po obliczeniu jego rozkładu na $\mathbf{LU}$ jako wektor prawych stron bierzemy wektor $[b_{p_i}]_{i=1}^{n}$.

W metodzie Doolittle'a warto wprowadzić także pomocniczy wektor $\mathbf{d}$ do którego wpisujemy wielkości które będą elementami podstawowymi (patrz równanie na poprzedniej stronie).

Stosując metodę z wyborem elementu podstawowego nie otrzymujemy rozkładu $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$ tylko rozkład macierzy $\mathbf{A}$ z przestawionymi wierszami. Można to zapisać jako $\mathbf{A} = \mathbf{PLU}$, gdzie $\mathbf{P}$ jest macierzą permutacji. Rozwiązujemy uklad równań

$$\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{PLU}\,\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff \mathbf{LU}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}^*, \tag{1.4.8}$$

gdzie $\mathbf{b}^* = [b_{p_i}]_{i=1}^{n}$.

1.5 Wyznaczanie macierzy odwrotnej. Obliczanie wyznacznika macierzy.

Macierz $\mathbf{A}^{-1}$ odwrotna do macierzy $\mathbf{A}$ spełnia równanie

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}, \tag{1.5.1}$$

gdzie $\mathbf{I}$ jest macierzą jednostkową. Jeśli istnieje macierz odwrotna, to spełnia ona także $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{I}$. Znając rozkład $\mathbf{LU}$ macierzy (ogólnie: potrafiąc rozwiązywać układ równań z tą macierzą z różnymi wyrazami wolnymi) można łatwo znaleźć macierz odwrotną, traktując równanie (1.5.1) jako n układów równań liniowych z wektorami prawych stron będących kolejnymi elementami naturalnej bazy. *Uwaga:* rozwiązywanie układu równań przy pomocy macierzy odwrotnej obarczone jest większym błędem numerycznym niż skorzystanie z rozkładu $\mathbf{LU}$!

Wyznacznik macierzy $\mathbf{A}$ łatwo jest wyznaczyć z jej rozkładu, korzystając z faktu, że wyznacznik iloczynu jest iloczynem wyznaczników. Wyznacznik macierzy trójkątnej jest zaś równy iloczynowi jej elementów diagonalnych. Mamy zatem

$$\det \mathbf{A} = \det(\mathbf{PLU}) = (-1)^{\#p} \prod_{i=1}^{n} u_{ii}, \tag{1.5.2}$$

gdzie $\#p$ jest ilością przestawień wierszy dokonanych podczas obliczania rozkładu $\mathbf{LU}$, gdyż $\det(\mathbf{P}) = (-1)^{\#p}$, $\det(\mathbf{L}) = \prod_{i=1}^{n} l_{ii} = 1$, zaś $\det(\mathbf{U}) = \prod_{i=1}^{n} u_{ii}$.

2 Zadanie domowe.

Napisać funkcję dokonującą rozkładu $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$ z częściowym wyborem elementu podstawowego oraz funkcję rozwiązująca układ równań $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ na podstawie rozkładu $\mathbf{LU}$ obliczanego przez poprzednią funkcję.

Funkcja licząca rozkład **LU** powinna zapisywać rozkład „w miejscu" (spakowany w postaci jednej macierzy) tzn. w postaci

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \multicolumn{5}{c}{\dotfill} \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Funkcja może nadpisywać macierz **A**. Macierz w której będzie zapisany rozkład **LU** oraz wektor **p** permutacji wierszy powinny być przekazywane jako parametry. Jeśli funkcja potrzebuje dodatkowych wektorów roboczych mogą być one również przekazywane jako parametry. Funkcja powinna zwracać 0 jeśli rozkład **LU** udało się wykonać; powinna zwracać k jeśli w k-tym kroku nie udało się znaleźć niezerowego elementu podstawowego.

Należy sprawdzić, czy wynik jest rzeczywiście rozkładem **LU** macierzy **A** o odpowiednio przestawionych wierszach, ewentualnie z jaką dokładnością.

Funkcja rozwiązująca układ równań $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ na podstawie wyników obliczonych przez poprzednią funkcję powinna jako argumenty przyjmować rozkład **LU** w postaci jednej macierzy, wektor **p** permutacji wierszy oraz wektor **b** prawej strony. Funkcja może nadpisywać wektor **b**. Obliczany wektor **x** może być zapisywany w jednym z parametrów, może też nadpisywać **b**. Funkcja powinna zwracać 0 jeśli udało się znaleźć rozwiązanie, k jeśli w k-tym kroku element przez który dzielilibyśmy jest równy 0.

Należy sprawdzić, czy otrzymany wynik spełnia zadane równanie (układ równań liniowych), ewentualnie z jaką dokładnością.

Sposób przekazywania macierzy do funkcji pozostawia się piszącemu program. Może to być przekazywanie macierzy o stałym rozmiarze, przekazywanie macierzy o stałej ilości kolumn (stałej długości wierszy) i przekazywanie ilości wierszy (która jest także ilością wykorzystywanych kolumn) jako parametru, przekazywanie macierzy jako tablicy wskaźników na wiersze i przekazywanie jej rozmiaru jak i przekazywanie macierzy w postaci spłaszczonej i przekazywanie ilości wierszy (i kolumn). Nie należy korzystać ze zmiennych globalnych do przekazywania parametrów!

Przygotował: Jakub Narębski