

Obliczenia naukowe

Wykład nr 8

Paweł Zieliński

Katedra Podstaw Informatyki,
Wydział Informatyki i Telekomunikacji,
Politechnika Wrocławska



Literatura

Literatura podstawowa

- [1] D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*, WNT, 2005.
- [2] M. T. Heath, *Scientific Computing, An Introductory Survey*, The McGraw-Hill Companies, 1997.
- [3] A. Bjorck, G. Dahlquist, *Metody numeryczne*, PWN, 1987.
- [4] M. Dryja, J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, cz. 2, WNT, 1988.
- [5] Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, *Metody numeryczne*, WNT 1998.
- [6] J. i M. Jankowscy, *Przegląd metod i algorytmów numerycznych*, cz. 1, WNT, 1988.
- [7] J. Stoer, R. Bulirsch, *Wstęp do analizy numerycznej*, PWN, 1987.

Literatura uzupełniająca

- [8] Kiełbasiński, H. Schwetlick, *Numeryczna algebra liniowa*, WNT, 1993.

Znaczna część wykładu została przygotowana na podstawie książki [1].



Rozwiązywanie układu równań liniowych

$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \mathbf{U} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$$

$$\begin{array}{ccccccc} u_{11}x_1 & + & u_{12}x_2 & + & \cdots & + & u_{1n}x_n = b_1 \\ & & u_{22}x_2 & + & \cdots & + & u_{2n}x_n = b_2 \\ & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & u_{nn}x_n = b_n \end{array}$$

Zakładamy, że macierz $\mathbf{U}$ jest nieosobliwa. Stąd $u_{kk} \neq 0$, $k = 1, \dots, n$. Wyznaczamy x_n z ostatniego równania

$$x_n = \frac{b_n}{u_{nn}}$$

Dalej wyznaczamy x_k dla $k = n-1, \dots, 1$

$$x_k = \frac{b_k - \sum_{j=k+1}^n u_{kj}x_j}{u_{kk}}$$



Rozwiązywanie układu równań liniowych - Eliminacja Gaussa

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n, \det(\mathbf{A}) \neq 0$$

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}, \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A}^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)} \quad \begin{array}{ccccccc} a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 & + & a_{22}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\ \vdots & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}^{(1)}x_1 & + & a_{n2}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)} \end{array}$$

Eliminujemy zmienną x_1 z równań od 2-go do n -tego. Mnożymy 1-sze równanie przez

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}} \quad i = 2, \dots, n$$

i odejmujemy od pozostałych.



Eliminacja Gaussa

Po pierwszym kroku otrzymujemy

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ \mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)} & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ & & \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ & & a_{n2}^{(2)}x_2 & + & \cdots & + & a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)} \end{array}$$

Eliminujemy zmienną x_2 z równań od 3-go do n -tego. Mnożymy 2-gie równanie przez

$$l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}} \quad i = 3, \dots, n$$

i odejmujemy od pozostałych.



Eliminacja Gaussa

Ogólnie po $k - 1$ krokach otrzymujemy

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}^{(1)} x_1 & + & a_{12}^{(1)} x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)} \\ & & a_{22}^{(2)} x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)} \\ & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & a_{kn}^{(k)} x_n = b_k^{(k)} \\ & & & & & & \vdots \\ & & & & & & a_{nn}^{(k)} x_n = b_n^{(k)} \end{array}$$

$$\mathbf{A}^{(k)} \mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k)}$$

Eliminujemy zmienną x_k z równań od $k + 1$ -tego do n -tego.

Mnożymy k -te równanie przez

$$l_{ik} = \frac{a_{i2}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} \quad i = k + 1, \dots, n$$

i odejmujemy od pozostałych.



Eliminacja Gaussa

Po $n - 1$ krokach dostajemy układ z macierzą górną trójkątną

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}^{(1)} x_1 & + & a_{12}^{(1)} x_2 & + & \cdots & + & a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)} \\ & & a_{22}^{(2)} x_2 & + & \cdots & + & a_{2n}^{(2)} x_n = b_2^{(2)} \\ & & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & & & a_{nn}^{(n)} x_n = b_n^{(n)} \end{array}$$

$\mathbf{A}^{(n)} \mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n)}$

```
for k ← 1 to n - 1 do
  for i ← k + 1 to n do
     $l_{ik} \leftarrow a_{ik}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}$ 
    for j ← k + 1 to n do
       $a_{ij}^{(k+1)} \leftarrow a_{ij}^{(k)} - l_{ik} a_{kj}^{(k)}$ 
    end for
     $b_i^{(k+1)} \leftarrow b_i^{(k)} - l_{ik} b_k^{(k)}$ 
  end for
end for
```



Eliminacja Gaussa - Macierzowe sformułowanie jednego kroku

Przejście od macierzy $\mathbf{A}^{(k)}$ do $\mathbf{A}^{(k+1)}$ i od wektora $\mathbf{b}^{(k)}$ do $\mathbf{b}^{(k+1)}$ możemy zapisać

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{L}^{(k)} \mathbf{A}^{(k)}, \quad \mathbf{b}^{(k+1)} = \mathbf{L}^{(k)} \mathbf{b}^{(k)},$$

gdzie

$$\mathbf{L}^{(k)} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & -l_{k+2,k} & & \ddots & \\ & & \vdots & & & \ddots \\ & & -l_{n,k} & & & & 1 \end{bmatrix}$$



Eliminacja Gaussa jako algorytm rozkładu trójkątnego

Proces sprowadzania macierzy $\mathbf{A}^{(1)}$ do macierzy górną trójkątnej $\mathbf{A}^{(n)}$ w $n - 1$ krokach możemy zapisać

$$\mathbf{A}^{(n)} = \mathbf{L}^{(n-1)} \dots \mathbf{L}^{(2)} \mathbf{L}^{(1)} \mathbf{A}^{(1)}$$

Oznaczając $\mathbf{A}^{(n)}$ przez $\mathbf{U}$ oraz z tego, że $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{(1)}$ mamy

$$\mathbf{U} = \mathbf{L}^{(n-1)} \dots \mathbf{L}^{(2)} \mathbf{L}^{(1)} \mathbf{A}$$

$$\mathbf{A} = (\mathbf{L}^{(n-1)} \dots \mathbf{L}^{(2)} \mathbf{L}^{(1)})^{-1} \mathbf{U}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}^{(1)-1} \mathbf{L}^{(2)-1} \dots \mathbf{L}^{(n-1)-1} \mathbf{U}$$



Rozkład LU

$$\mathbf{L}^{(k)-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & l_{k+1,k} & 1 & \\ & & l_{k+2,k} & & \\ & & \vdots & & \ddots \\ & & l_{n,k} & & & 1 \end{bmatrix} \quad \mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix},$$

gdzie $\mathbf{L} = \mathbf{L}^{(1)-1} \mathbf{L}^{(2)-1} \dots \mathbf{L}^{(n-1)-1}$.

Jak widać eliminacja Gaussa jest równoważna rozkładowi macierzy $\mathbf{A}$ na iloczyn $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$

macierzy dolnej i górno trójkątnej.



Rozkład LU

W komputerowej realizacji rozkład LU pamiętamy w jednej tablicy umieszczając mnożniki $l_{ik}^{(k)}$ w miejscu zerowanych elementów $a_{ik}^{(k)}$.

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix} \rightarrow \mathbf{LU} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{n,n} \end{bmatrix}$$

Znając rozkład $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ zadanie $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ sprowadzamy do rozwiązania dwóch układów trójkątnych

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b} \text{ i } \mathbf{Ux} = \mathbf{y}$$

Rozwiązanie układu $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ odpowiada

$$\mathbf{y} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{b} = \mathbf{L}^{(n-1)} \dots \mathbf{L}^{(2)}\mathbf{L}^{(1)}\mathbf{b} = \mathbf{b}^{(n)}.$$



Obliczanie wyznacznika i macierzy odwrotnej

Założmy, że znamy rozkład $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$ wówczas

$$\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{LU}) = \det(\mathbf{L})\det(\mathbf{U}) = \prod_{i=1}^n u_{ii}.$$

Z definicji $\mathbf{A}^{-1}$ jest macierzą odwrotną $\mathbf{A}$, jeżeli

$$\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{I}$$

Oznaczając $\mathbf{A}^{-1}$ przez $\mathbf{X}$ mamy

$$\mathbf{AX} = \mathbf{I} \Leftrightarrow \mathbf{A}[\mathbf{x}^{(1)}, \dots, \mathbf{x}^{(n)}] = [\mathbf{e}^{(1)}, \dots, \mathbf{e}^{(n)}], \quad \mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{e}^{(i)} \in \mathbb{R}^n$$

gdzie $\mathbf{x}^{(i)}$ jest i -tą kolumną macierzy odwrotnej, $\mathbf{e}^{(i)}$ jest i -tą kolumną macierzy jednostkowej.



Obliczanie macierzy odwrotnej

Znając rozkład $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$ wyznaczamy n kolumn macierzy $\mathbf{A}^{-1}$ co jest równoważne rozwiązaniu $2n$ układów trójkątnych

$$\begin{aligned} \mathbf{LU}\mathbf{x}^{(i)} &= \mathbf{e}^{(i)}, \quad i = 1, \dots, n \\ \mathbf{L}\mathbf{y}^{(i)} &= \mathbf{e}^{(i)}, \quad \mathbf{U}\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{y}^{(i)} \quad i = 1, \dots, n \end{aligned}$$



Wybór elementu głównego

Wariant podstawowy metody eliminacji Gaussa może być stosowany jeżeli wszystkie elementy przekątne $a_{kk}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots, n - 1$ są różne od zera. Warunek ten nie jest spełniony nawet dla macierzy nieosobliwych, jak na przykład poniższy układ

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

W tym przypadku wystarczy zamienić równania miejscami. Należy podkreślić, że w numerycznej realizacji ważne jest nie tylko, aby elementy $a_{kk}^{(k)}$ były różne od zera, ale by nie były zbyt małe co do wartości bezwzględnej.



Wybór elementu głównego

Rozważmy przykład układ równań, w którym ϵ jest małą liczbą

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Po zastosowaniu eliminacji Gaussa otrzymujemy układ trójkątny

$$\begin{bmatrix} \epsilon & 1 \\ 0 & 1 - \epsilon^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 - \epsilon^{-1} \end{bmatrix}$$

Rozwiązując otrzymujemy

$$x_2 = (2 - \epsilon^{-1}) / (1 - \epsilon^{-1}), \quad x_1 = (1 - x_2)\epsilon^{-1}$$



Wybór elementu głównego

Jeżeli ϵ jest wystarczająco małe np. $\epsilon = 10^{-8}$ ($\epsilon^{-1} = 10^8$) w arytmetyce `single`, wówczas $2 - \epsilon^{-1} \approx -\epsilon^{-1}$ i $1 - \epsilon^{-1} \approx -\epsilon^{-1}$. Stąd obliczone $x_2 \approx 1$ i $x_1 \approx 0$ znacznie różnią się od prawidłowych wartości $x_2 \approx 1$ i $x_1 \approx 1$.

Problem znika jeżeli zamienimy równania

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Stosując eliminację Gaussa dostajemy układ trójkątny

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 - \epsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 - 2\epsilon \end{bmatrix}$$

Rozwiązując otrzymujemy prawidłowe

$$x_2 = (1 - 2\epsilon)/(1 - \epsilon) \approx 1, \quad x_1 = (2 - x_2) \approx 1.$$



Wybór elementu głównego

Rozważmy k -ty krok eliminacji Gaussa.

- eliminacja Gaussa z *częściowym wyborem* polega na znalezieniu elementu takiego, że

$$|a_{pk}^{(k)}| = \max_{k \leq i \leq n} |a_{ik}^{(k)}|$$

i przestawieniu w macierzy $\mathbf{A}^{(k)}$ wiersza p -tego z k -tym oraz elementu p -tego z k -tym w wektorze $\mathbf{b}^{(k)}$.

- eliminacja Gaussa z *pełnym wyborem* polega na znalezieniu elementu takiego, że

$$|a_{pl}^{(k)}| = \max_{k \leq i, j \leq n} |a_{ij}^{(k)}|$$

i przestawieniu w macierzy $\mathbf{A}^{(k)}$ wiersza p -tego z k -tym, kolumny l -tej z k -tą oraz elementu p -tego z k -tym w wektorze $\mathbf{b}^{(k)}$.



Wybór elementu głównego

Niech P_{ij} będzie macierzą *permutacji*

$$P_{ij} = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 0 & \dots & 1 \\ & & \vdots & & \vdots \\ & & 1 & \dots & 0 \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

P_{ij} różni się od macierzy jednostkowej elementami $p_{ii} = p_{jj} = 0$ i $p_{ij} = p_{ji} = 1$. Ponadto $P_{ij}^T = P_{ij} = P_{ij}^{-1}$, $P_{ij}^2 = I$. $P_{ij}A$ jest równoważne zamianie w macierzy A wiersza i -tego z j -tym. AP_{ij} jest równoważne zamianie w macierzy A kolumny i -tej z j -tą.



Wybór elementu głównego

W metodzie eliminacji Gaussa z częściowym wyborem $\overline{P} = I$.
Zatem

$$LU = PA$$

Znany rozkład $LU = PA$ możemy wykorzystać do rozwiązywania układu równań $Ax = b$

$$Ly = Pb \text{ i } Ux = y.$$

Wyznacznik macierzy obliczamy następująco

$$\det(A) = (-1)^p \prod_{i=1}^n u_{ii},$$

gdzie p jest liczbą przestawień kolumn i wierszy.

