Metody numeryczne I

Układy równań liniowych, część I

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Układy równań liniowych, część I

1. Powtórka z algebry liniowej
2. Metody dokładne rozwiązywania układów równań
   - Analiza zaburzeń
   - Wzory Cramera
   - Układy trójkątne
   - Eliminacja Gaussa
   - Rozkład **LU**

Układy równań liniowych, część I

2. Metody dokładne rozwiązywania układów równań (cd.)
   - Metoda Doolittle'a
   - Macierze dominujące diagonalnie
   - Równoważenie układów liniowych
   - Metoda eliminacji Jordana
   - Inne metody dokładne
   - Układy z macierzą trójdiagonalną
   - Wyznaczniki
   - Macierze odwrotne

Normy

Równoważne normy wektora $x = [x_1, \ldots, x_n]^{\mathrm{T}} \in \mathcal{R}^n$

$$\begin{aligned} \|x\|_1 &= |x_1| + \ldots + |x_n| \\ \|x\|_2 &= (x_1^2 + \ldots + x_n^2)^{1/2} \\ \|x\|_\infty &= \max\{|x_1|, \ldots, |x_n|\} \end{aligned}$$

Norma macierzy

$$\|\mathbf{A}\|_{pq} = \max_{\substack{x \in \mathcal{R}^n \\ x \neq 0}} \frac{\|\mathbf{A}x\|_q}{\|x\|_p}$$

Najczęściej stosowane normy

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{A}\|_1 &= \max_{j=1,\dots,n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \\
\|\mathbf{A}\|_2 &= \sqrt{\lambda_{max}} \\
\|\mathbf{A}\|_\infty &= \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \\
\|\mathbf{A}\|_E &= \sqrt{\sum_{i=1}^{m} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2}
\end{aligned}$$

Macierze trójkątne

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

- sumy, iloczyny i odwrotności macierzy trójkątnych tego samego rodzaju są znów macierzami trójkątnymi
- $\det \mathbf{L} = l_{11} \cdot l_{22} \dots l_{nn}$
- $\det \mathbf{U} = u_{11} \cdot u_{22} \dots u_{nn}$

Wyznaczniki

Definicja Wyznacznikiem macierzy kwadratowej $\mathbf{A}$ nazywamy liczbę

$$\det \mathbf{A} = \sum_f (-1)^{I_f} a_{1\alpha_1} a_{2\alpha_2} \dots a_{n\alpha_n},$$

gdzie $\sum_f$ oznacza sumowanie po wszystkich permutacjach liczb naturalnych 1, 2, ..., n, a I_f oznacza ilość inwersji w permutacji f.

Rozwinięcia Laplace'a:

$$\begin{aligned}
\det \mathbf{A} &= \sum_{j=1}^{n} a_{ij} A_{ij} \\
\det \mathbf{A} &= \sum_{j=1}^{n} a_{jk} A_{jk}
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ wyliczenie wyznacznika macierzy $n \times n$ wymaga $n!$ mnożeń

$\Rightarrow$ dla dużych n (rzędu np. 1000 czy 100000) powyższe wzory są bezużyteczne

Układy równań liniowych

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + \ldots + a_{mn}x_n &= b_m \end{aligned}$$

Macierz układu

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

Macierz rozszerzona układu

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} & b_m \end{pmatrix}$$

Twierdzenie (**Capellego**) Warunkiem koniecznym i wystarczającym rozwiązywalności dowolnego układu równań liniowych jest, aby rząd r macierzy $\mathbf{A}$ układu był równy rzędowi macierzy rozszerzonej $\mathbf{D}$.

Jeśli

n - liczba niewiadomych

r - rząd macierzy $\mathbf{A}$ i $\mathbf{D}$

$\Rightarrow$ układ posiada rozwiązanie zależne od $(n-r)$ parametrów

Metody bezpośrednie (dokładne)

Definicja Metodami dokładnymi rozwiązywania układów równań nazywamy metody, które przy braku błędów zaokrągleń dają dokładne rozwiązanie po skończonej liczbie przekształceń układu wyjściowego

Zalety:

- duża efektywność dla układów o macierzach pełnych

Wady:

- duże obciążenie pamięci
- możliwa niestabilność ze względu na błędy zaokrągleń

Analiza zaburzeń

Rozwiązanie przybliżone układu

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

zastępujemy rozwiązaniem dokładnym układu

$$(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})(x + \delta x) = b + \delta b$$

$\delta b \neq 0$ i $\delta\mathbf{A} = 0$

W tym przypadku mamy

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(x + \delta x) &= b + \delta b \\ \mathbf{A}x + \mathbf{A}\delta x &= b + \delta b \\ \mathbf{A}\delta x &= \delta b \\ \delta x &= \mathbf{A}^{-1}\delta b \end{aligned}$$

Stąd dla dowolnych norm wektorów δx oraz δb

$$\|\delta x\|_p \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|_{qp}\|\delta b\|_q$$

Jeśli $b \neq 0$, to

$$\begin{aligned} \frac{\|\delta x\|_p}{\|x\|_p} &\leq \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\|_{qp}}{\|x\|_p}\|\delta b\|_q \\ &= \frac{\|\mathbf{A}^{-1}\|_{qp}\|b\|_q}{\|x\|_p}\frac{\|\delta b\|_q}{\|b\|_q} \\ &\leq K_{pq}\frac{\|\delta b\|_q}{\|b\|_q} \end{aligned}$$

gdzie K_{pq} to wskaźnik uwarunkowania układu

$$K_{pq} = \|\mathbf{A}^{-1}\|_{qp}\|\mathbf{A}\|_{pq}$$

Przykład

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1,2969 & 0,8648 \\ 0,2161 & 0,1441 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{A}^{-1} = 10^8 \begin{pmatrix} 0,1441 & -0,8648 \\ -0,2161 & 1,2969 \end{pmatrix}$$

$$\|\mathbf{A}\|_\infty = 2,1617, \quad \|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty = 1,513 * 10^8$$

$$K = \|\mathbf{A}^{-1}\|_\infty\|\mathbf{A}\|_\infty \approx 3,3 * 10^8$$

$\Rightarrow$ rozwiązując układ opisany macierzą $\mathbf{A}$ w najgorszym wypadku możemy utracić 8 miejsc istotnych dokładności

$\Rightarrow$ układ bardzo źle uwarunkowany

$\delta b = 0$ i $\delta \mathbf{A} \neq 0$

Z równania macierzowego

$$(\mathbf{A} + \delta\mathbf{A})(x + \delta x) = b$$

wynika

$$\delta x = -\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A}(x + \delta x)$$

a stąd

$$\|\delta x\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| * \|\delta\mathbf{A}\|\|x + \delta x\|$$

czyli

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x + \delta x\|} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| * \|\delta\mathbf{A}\| = K\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}$$

$\delta b \neq 0$ i $\delta \mathbf{A} \neq 0$

Niech

U	-	jednostka maszynowa
$\mathbf{A} + \delta\mathbf{A}$	-	macierz $\mathbf{A}$ po zaokrągleniu

Wówczas

$$|(a_{ij} + \delta a_{ij}) - a_{ij}| = |\delta a_{ij}| \leq U|a_{ij}|$$

$$\max_{1\leq i\leq n}\sum_{j=1}^{n}|\delta a_{ij}| \leq U\max_{1\leq i\leq n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|,$$

czyli

$$\|\delta\mathbf{A}\| \leq U\|\mathbf{A}\|$$

Analogicznie

$$\|\delta b\| \leq U\|b\|$$

Biorąc pod uwagę poprzednie przypadki, otrzymamy

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq 2UK$$

Wzory Cramera

Twierdzenie Układ równań liniowych Cramera ma dokładnie jedno rozwiązanie postaci

$$x_k = \frac{\det \mathbf{A_k}}{\det \mathbf{A}}, \quad k = 1, 2, \ldots, n,$$

gdzie macierz $\mathbf{A_k}$ powstaje z macierzy $\mathbf{A}$ przez zastąpienie k–tej kolumny przez wektor b.

Własności:

- oszczędność pamięci
- bardzo duży nakład obliczeń (wyklucza praktyczne zastosowania dla dużych n)

Układy trójkątne

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned}$$

Rozwiązanie (tzw. podstawianie wstecz)

$$x_n = \frac{b_n}{a_{nn}}, \quad x_i = \frac{b_i - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik}x_k}{a_{ii}}$$

gdzie $i = n-1, n-2, \ldots, 1$

Jeśli macierz układu jest macierzą trójkątną dolną, stosujemy podstawianie w przód:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{b_1}{a_{11}} \\ x_i &= \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} a_{ik}x_k}{a_{ii}}, \quad i = 2, \ldots, n \end{aligned}$$

Nakład obliczeń:

- $M = \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n$ mnożeń i dzieleń
- $D = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$ dodawań

Eliminacja Gaussa

(i) sprowadzenie układu do postaci trójkątnej (eliminacja zmiennych),

(ii) rozwiązanie układu trójkątnego

Rozważmy układ równań $\mathbf{A}^{(1)}x = b^{(1)}$ postaci

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\ a_{21}^{(1)}x_1 & + & a_{22}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\ & & & & & & & \vdots & \\ a_{n1}^{(1)}x_1 & + & a_{n2}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)} \end{array}$$

Od i–tego wiersza ($i = 2, 3, \ldots, n$) odejmujemy pierwszy pomnożony przez $a_{i1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}^{(2)}x_1 & + & a_{12}^{(2)}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}^{(2)}x_n & = & b_1^{(2)} \\ & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\ & & & & & & & \vdots & \\ & & a_{n2}^{(2)}x_2 & + & \ldots & + & a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)} \end{array}$$

$\Rightarrow$ wyeliminowaliśmy x_1 z wierszy $i = 2, 3, \ldots, n$

Odejmujemy od j–tego wiersza układu ($j = 3, 4, \ldots, n$) wiersz drugi pomnożony przez $a_{j2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}$

$$\begin{array}{ccccccccccc} a_{11}^{(3)}x_1 & + & a_{12}^{(3)}x_2 & + & a_{13}^{(3)}x_3 & + & \ldots & + & a_{1n}^{(3)}x_n & = & b_1^{(3)} \\ & & a_{22}^{(3)}x_2 & + & a_{23}^{(3)}x_3 & + & \ldots & + & a_{2n}^{(3)}x_n & = & b_2^{(3)} \\ & & & & & & & & \vdots & & \\ & & & & a_{n3}^{(3)}x_3 & + & \ldots & + & a_{nn}^{(3)}x_n & = & b_n^{(3)} \end{array}$$

$\Rightarrow$ wyeliminowaliśmy x_2 z wierszy $i = 3, \ldots, n$

Po $(n-1)$ eliminacjach

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

Nakład obliczeń

- $M = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}$ mnożeń i dzieleń
- $D = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$ dodawań

Częściowy wybór elementu podstawowego

Przykład Rozważmy układ

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 3 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

- istnieje jednoznaczne rozwiązanie, ale ...
- stosując eliminację Gaussa obliczenia zostaną przerwane przy eliminacji x_1, ponieważ $a_{11} = 0$

$\Rightarrow$ metoda nie jest niezawodna

Definicja Elementem podstawowym nazywamy ten element macierzy **A**, za pomocą którego dokonujemy eliminacji zmiennej z dalszych równań

Metoda Gaussa-Crouta (modyfikacja eliminacji Gaussa):

- zmień kolejność wierszy (rozwiązanie układu nie zmienia się), aby znaleźć optymalny element podstawowy

Przykład Rozważmy ponownie układ

$$\begin{pmatrix} 0 & 2 & 2 \\ 3 & 3 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \end{pmatrix}$$

Zamieniamy wiersz pierwszy z trzecim,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dokonujemy eliminacji

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & -3 \\ 0 & 0 & 4 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 2 \\ -3 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Podstawiając wstecz, otrzymujemy

$$x = \begin{pmatrix} \frac{5}{4} \\ -\frac{1}{4} \\ \frac{3}{4} \end{pmatrix}$$

Przykład

```
SUBROUTINE ELGS (A,N,INDX)
  IMPLICIT NONE
  INTEGER, INTENT (IN) :: N
  INTEGER :: I,J,K,ITMP
  INTEGER, INTENT (OUT), DIMENSION (N) :: INDX
  REAL :: C1,PI,PI1,PJ
  REAL, INTENT (INOUT), DIMENSION (N,N) :: A
  REAL, DIMENSION (N) :: C

  DO I = 1, N
    INDX(I) = I
  END DO
```

```
DO J = 1, N-1
  PI1 = 0.0
  DO I = J, N
    PI = ABS(A(INDX(I),J))
    IF (PI.GT.PI1) THEN
      PI1 = PI; K = I   !wybór elementu podstawowego
    ENDIF
  END DO
  ITMP = INDX(J); INDX(J) = INDX(K); INDX(K) = ITMP
  DO I = J+1, N
    PJ  = A(INDX(I),J)/A(INDX(J),J)
    A(INDX(I),J) = PJ   !zapisz PJ poniżej przekątnej
    DO K = J+1, N
      A(INDX(I),K) = A(INDX(I),K)-PJ*A(INDX(J),K)
    END DO
  END DO
END DO
END SUBROUTINE ELGS
```



```
SUBROUTINE LEGS (A,N,B,X,INDX)
  IMPLICIT NONE
  INTEGER, INTENT (IN) :: N
  INTEGER :: I,J
  INTEGER, INTENT (OUT), DIMENSION (N) :: INDX
  REAL, INTENT (INOUT), DIMENSION (N,N) :: A
  REAL, INTENT (INOUT), DIMENSION (N) :: B
  REAL, INTENT (OUT), DIMENSION (N) :: X

  CALL ELGS (A,N,INDX)

  DO I = 1, N-1
    DO J = I+1, N !zmodyfikuj b
      B(INDX(J)) = B(INDX(J))-A(INDX(J),I)*B(INDX(I))
    END DO
  END DO
```



```
X(N) = B(INDX(N))/A(INDX(N),N) !oblicz x
DO I = N-1, 1, -1
  X(I) = B(INDX(I))
  DO J = I+1, N
    X(I) = X(I)-A(INDX(I),J)*X(J)
  END DO
  X(I) =  X(I)/A(INDX(I),I)
END DO
END SUBROUTINE LEGS
```


Rozkład LU

$$\mathbf{A}^{(1)}x = b^{(1)} \quad \longrightarrow \quad \mathbf{A}^{(2)}x = b^{(2)}$$

jest równoważne pomnożeniu obu stron układu $\mathbf{A}^{(1)}x = b^{(1)}$ przez macierz

$$\mathbf{L}^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -l_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -l_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \quad l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad i = 2, 3, \dots, n$$

Otrzymujemy dwa równania:

$$\mathbf{L}^{(1)}\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}^{(2)}, \;\; \mathbf{L}^{(1)}b^{(1)} = b^{(2)}$$

Podobnie,

$$\mathbf{L}^{(2)}\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{A}^{(3)}, \;\; \mathbf{L}^{(2)}b^{(2)} = b^{(3)}$$

$$\mathbf{L}^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -l_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -l_{n2} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \;\; l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \;\; i = 3, \dots, n$$

Ostatecznie

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

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

Macierze $\mathbf{L}^{(i)}$, $i = 1, \dots, n-1$, są nieosobliwe, możemy więc zapisać

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

Ponadto,

$$\mathbf{L} \equiv (\mathbf{L}^{(1)})^{-1}(\mathbf{L}^{(2)})^{-1} \dots (\mathbf{L}^{(n)})^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

$\mathbf{A}^{(n)}$ jest macierzą trójkątną górną

$$\Rightarrow \mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$$

Zastosowanie do układów równań liniowych

$$\mathbf{A}x = b \rightarrow \begin{cases} \mathbf{L}y = b \\ \mathbf{U}x = y \end{cases}$$

- zapamiętując $\mathbf{L}$ i $\mathbf{U}$, możemy szybko rozwiązać wiele układów różniących się wektorami b

Zarządzanie pamięcią komputera:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

Metoda Doolitle'a

Przykład

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix}$$

Stąd

$$\begin{array}{lll} 3 = u_{11}, & 3 = u_{12}, & 0 = u_{13} \\ 0 = 3l_{21}, & 1 = 3l_{31}, & 2 = 0 * 3 + u_{22} \\ 2 = 0 + u_{23}, & 0 = \frac{1}{3} * 3 + 2l_{32}, & 1 = 0 + \left(-\frac{1}{2}\right) * 2 * u_{33} \end{array}$$

czyli

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

W przypadku ogólnym dla $i = 1, 2, \dots, n$

$$\begin{aligned} u_{ij} &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad j = i, i+1, \dots, n, \\ l_{ji} &= \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{jk} u_{ki}}{u_{ii}}, \quad j = i+1, i+2, \dots, n \end{aligned}$$

Nakład obliczeń:

- rozkład $\mathbf{LU}$
  $M = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n$ mnożeń, $D = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n$ dodawań
- rozkład $\mathbf{LU}$ i rozwiązanie układu równań
  $M = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$ i $D = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{3}n^2 - \frac{5}{6}n$

Przykład

$$\begin{pmatrix} 20 & 31 & 23 \\ 30 & 24 & 18 \\ 15 & 32 & 21 \end{pmatrix}$$

Wprowadzamy dodatkową kolumnę indeksującą wiersze

$$\begin{pmatrix} 20 & 31 & 23 \\ 30 & 24 & 18 \\ 15 & 32 & 21 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Element podstawowy wybieramy tak, aby u_{ii} miało jak największą wartość.

Dla $i = 1$ w zależności od tego, czy na pierwszym miejscu ustawimy wiersz pierwszy, drugi czy trzeci, uzyskamy odpowiednio $u_{11} = 20$, $u_{11} = 30$ oraz $u_{11} = 15$. Dlatego zamieniamy miejscami wiersz pierwszy z drugim,

$$\begin{pmatrix} 30 & 24 & 18 \\ 20 & 31 & 23 \\ 15 & 32 & 21 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Obliczamy:

$$u_{11} = 30, \quad u_{12} = a_{21} = 24, \quad u_{13} = a_{13} = 18,$$
$$l_{21} = \tfrac{2}{3}, \qquad l_{31} = \tfrac{1}{2}$$

Wartości te wpisujemy do macierzy $\mathbf{A}$

$$\begin{pmatrix} 30 & 24 & 18 \\ \frac{2}{3} & 31 & 23 \\ \frac{1}{2} & 32 & 21 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Dla $i = 2$ otrzymamy

$$u_{22} = a_{22} - a_{21}a_{12} = 15 \;\text{ lub }\; u_{22} = a_{32} - a_{31}a_{12} = 20$$

w zależności od tego, czy na drugim miejscu ustawimy wiersz drugi czy trzeci. Zamieniamy wiersze miejscami

$$\begin{pmatrix} 30 & 24 & 18 \\ \frac{1}{2} & 32 & 21 \\ \frac{2}{3} & 31 & 23 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Obliczamy

$$u_{22} = 20, \quad u_{23} = a_{23} - a_{21}a_{13} = 12, \quad u_{32} = \frac{15}{20}$$

Stąd

$$\begin{pmatrix} 30 & 24 & 18 \\ \frac{1}{2} & 20 & 12 \\ \frac{2}{3} & \frac{3}{4} & 23 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Dla $i = 3$ obliczamy

$$u_{33} = 2$$

Stąd

$$\begin{pmatrix} 30 & 24 & 18 \\ \frac{1}{2} & 20 & 12 \\ \frac{2}{3} & \frac{3}{4} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow$ w miejsce macierzy $\mathbf{A}$ otrzymaliśmy rozkład $\mathbf{LU}$ macierzy, która składa się z wierszy 2, 3 i 1 macierzy wyjściowej $\mathbf{A}$

Błędy zaokrągleń

Trzy etapy rozwiązania

(i) wyznaczenie rozkładu $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{LU}$ metodą Gaussa lub Doolittle'a. $\tilde{\mathbf{A}}$ to macierz wyjściowa z odpowiednio poprzestawianymi wierszami

(ii) rozwiązanie układu $\mathbf{L}y = b$

(iii) rozwiązanie układu $\mathbf{U}x = y$

W etapie pierwszym:

$$\mathbf{LU} = \tilde{\mathbf{A}} + \mathbf{E}$$

gdzie macierz $\mathbf{E}$ to błąd rozkładu

W etapie drugim i trzecim:

$$\begin{aligned} (\mathbf{L} + \delta\mathbf{L})y &= b \\ (\mathbf{U} + \delta\mathbf{U})x &= y \end{aligned}$$

Stąd

$$(\tilde{\mathbf{A}} + \mathbf{E} + \mathbf{L}\delta\mathbf{U} + \delta\mathbf{L}\mathbf{U} + \delta\mathbf{L}\delta\mathbf{U})x = b$$

Można pokazać, że zaburzenie

$$\delta\mathbf{A} = \mathbf{E} + \mathbf{L}\delta\mathbf{U} + \delta\mathbf{L}\mathbf{U} + \delta\mathbf{L}\delta\mathbf{U}$$

ma oszacowanie

$$\frac{\|\delta \mathbf{A}\|}{\|\tilde{\mathbf{A}}\|} \leq \epsilon \left(\frac{9}{2}n^3 + \frac{61}{2}n^2 - 18n - 16 \right) + O(\epsilon)$$

Stąd wynika

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\alpha}{1-\alpha}$$

gdzie

$$\begin{array}{rcl} \alpha & = & \epsilon K O\left(\frac{9}{2}n^3\right) \\ O\left(\frac{9}{2}n^3\right) & = & \left(\frac{9}{2}n^3 + \frac{61}{2}n^2 - 18n - 16\right) \\ K & - & \text{wskaźnik uwarunkowania} \end{array}$$

Macierze dominujące diagonalnie

Definicja Macierz kwadratową $\mathbf{A}$ nazywamy diagonalnie dominującą, jeżeli

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{n} |a_{ik}|, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Definicja Macierz $\mathbf{A}$ jest diagonalnie dominująca kolumnowo, jeżeli $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}$ jest diagonalnie dominująca, tzn.

$$|a_{ii}| \geq \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{n} |a_{ki}|, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Macierze dominujące diagonalnie

Twierdzenie Jeżeli macierz $\mathbf{A}$ jest nieosobliwa i diagonalnie dominująca kolumnowo, to przy eliminacji metodą Gaussa–Crouta nie ma potrzeby przestawiania wierszy.

Dowód Pokażemy, że po wyeliminowaniu m niewiadomych macierz jest nadal diagonalnie dominująca kolumnowo. Macierz $\mathbf{A}^{(1)}$ jest diagonalnie dominująca kolumnowo z założenia. Pierwszym elementem podstawowym jest więc $a_{11}^{(1)}$. Wszystkie mnożniki $l_{k1} = a_{k1}^{(1)}/a_{11}^{(1)}$, $k = 2, \ldots, n$, spełniają warunek

$$\sum_{k=2}^{n} |l_{k1}| \leq 1$$

Po eliminacji pierwszej niewiadomej uzyskamy z kolumn i wierszy o numerach $2, \ldots, n$ macierz o elementach

$$a_{ki}^{(2)} = a_{ki}^{(1)} - l_{k1} a_{1i}^{(1)}, \quad k, i = 2, \ldots, n$$

Stąd

$$\begin{array}{rcl} |a_{ii}^{(2)}| & \geq & |a_{ii}^{(1)}| - |l_{i1}| \cdot |a_{1i}^{(1)}| \\ |a_{ki}^{(2)}| & \leq & |a_{ki}^{(1)}| + |l_{k1}| \cdot |a_{1i}^{(1)}| \end{array}$$

Stąd

$$|a_{ii}^{(2)}| - \sum_{\substack{k=2 \\ k\neq i}}^{n} |a_{ki}^{(2)}| \geq |a_{ii}^{(1)}| - |a_{1i}^{(1)}| \sum_{k=2}^{n} |l_{k1}| - \sum_{\substack{k=2 \\ k\neq i}}^{n} |a_{1i}^{(1)}| \geq 0$$

czyli $\mathbf{A}^{(2)}$ jest diagonalnie dominująca kolumnowo. Podobnie postępujemy w przypadku dalszych eliminacji. ∎

Równoważenie układów liniowych

Przykład

$$\begin{pmatrix} 1 & 10000 \\ 1 & 0,0001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10000 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Układ ten ma rozwiązanie $x_1 = x_2 = 0,9999$ (zaokrąglone do czterech cyfr dziesiętnych)

Niech a_{11} będzie elementem podstawowym. Szukamy rozwiązań układu w trzycyfrowej arytmetyce zmiennopozycyjnej:

$$\tilde{x}_1 = 0.00, \;\; \tilde{x}_2 = 1.00 \;\; \text{(b. złe!)}$$

Pomnóżmy teraz pierwsze równanie przez 10^{-4}

$$\begin{pmatrix} 0,0001 & 1 \\ 1 & 0,0001 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Wybierając a_{21} jako element podstawowy, otrzymamy

$$\tilde{x}_1 = 1.00, \;\; \tilde{x}_2 = 1.00$$

co w trzycyfrowej arytmetyce jest wynikiem dobrym

Definicja Zrównoważeniem układu będziemy nazywali takie przeskalowanie zmiennych, po którym macierz układu będzie spełniała warunek

$$\max_{1\leq j\leq n} |a_{ij}| = 1, \;\; i = 1, \ldots, n.$$

Metoda eliminacji Jordana

$$
\begin{array}{ccccccccc}
a_{11}^{(1)}x_1 & + & a_{12}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}^{(1)}x_n & = & b_1^{(1)} \\
a_{21}^{(1)}x_1 & + & a_{22}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}^{(1)}x_n & = & b_2^{(1)} \\
 & & & & & & & \vdots & \\
a_{n1}^{(1)}x_1 & + & a_{n2}^{(1)}x_2 & + & \ldots & + & a_{nn}^{(1)}x_n & = & b_n^{(1)}
\end{array}
$$

Dzielimy pierwsze równanie obustronnie przez $a_{11}^{(1)}$, a następnie od i–tego wiersza ($i = 2, 3, \ldots, n$) odejmujemy pierwszy pomnożony przez $a_{i1}^{(1)}$

$$
\begin{array}{ccccccccc}
x_1 & + & a_{12}^{(2)}x_2 & + & \ldots & + & a_{1n}^{(2)}x_n & = & b_1^{(2)} \\
 & & a_{22}^{(2)}x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}^{(2)}x_n & = & b_2^{(2)} \\
 & & & & & & & \vdots & \\
 & & a_{n2}^{(2)}x_2 & + & \ldots & + & a_{nn}^{(2)}x_n & = & b_n^{(2)}
\end{array}
$$

W kolejnym kroku dzielimy drugie równanie obustronnie przez $a_{22}^{(2)}$ i odejmujemy od i–tego wiersza ($i = 1, 3, 4, \ldots, n$) wiersz drugi pomnożony przez $a_{i2}^{(2)}$

$$
\begin{array}{ccccccccc}
x_1 & & & + & \ldots & + & a_{1n}^{(3)}x_n & = & b_1^{(3)} \\
 & & x_2 & + & \ldots & + & a_{2n}^{(3)}x_n & = & b_2^{(3)} \\
 & & & & & & & \vdots & \\
 & & & & \ldots & + & a_{nn}^{(3)}x_n & = & b_n^{(3)}
\end{array}
$$

Po $(n-1)$ eliminacjach otrzymujemy układ

$$
\begin{array}{ccccc}
x_1 & & & = & b_1^{(n)} \\
 & x_2 & & = & b_2^{(n)} \\
 & & \ddots & & \vdots \\
 & & x_n & = & b_n^{(n)}
\end{array}
$$

Nakład obliczeń:

$$M = \frac{1}{2}n^3 + \frac{1}{2}n^2, \quad D = \frac{1}{2}n^3 - \frac{1}{2}$$

$\Rightarrow$ około półtora raza więcej niż w eliminacji Gaussa

Zalety:

- oszczędne gospodarowanie pamięcią
- możliwość rozwiązania "obciętego " układu równań

Wady:

- duży nakład obliczeń
- brak odpowiednika rozkładu $\mathbf{LU}$

Inne metody dokładne

- rozkład $\mathbf{LDL}^{\mathrm{T}}$, gdzie $\mathbf{D}$ to macierz diagonalna
  - stosowany, gdy macierz $\mathbf{A}$ jest symetryczna
  - równanie wyjściowe zastępuje się trzema innymi
  - oszczędność pamięci, mała liczba działań
- rozkład $\mathbf{LL}^{\mathrm{T}}$ (Cholesky'ego, Banachiewicza)
  - dla macierzy symetrycznych, dodatnio określonych
  - mały nakład obliczeń, oszczędność pamięci

Układy z macierzą trójdiagonalną

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & & 0 & \\ & a_3 & b_3 & c_3 & & & \\ & & a_4 & b_4 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & 0 & & & \ddots & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & & & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

Rozkład $\mathbf{LU}$ tej macierzy ma postać

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ l_2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & l_n & 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} u_1 & c_1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & c_{n-1} \\ 0 & & & u_n \end{pmatrix}$$

$$\begin{aligned} u_1 &= b_1 \\ l_i &= \frac{a_i}{u_{i-1}}, \quad u_i = b_i - l_i c_{i-1}, \quad i = 2, 3, \ldots, n \end{aligned}$$

Aby znaleźć rozwiązanie układu $\mathbf{T}x = b$, rozwiązujemy dwa układy równań

$$\mathbf{L}y = b, \quad \mathbf{U}x = y$$

według wzorów

$$y_1 = b_1, \quad y_i = b_i - l_i y_{i-1}, \quad i = 2, \ldots, n$$

oraz

$$x_n = \frac{y_n}{u_n}, \quad x_i = \frac{y_i - c_i x_{i+1}}{u_i}, \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

Własności:

- metoda jest niezawodna, jeśli macierz $\mathbf{T}$ jest diagonalnie dominująca
- oszacowanie błędu wynosi

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\alpha}{1-\alpha}$$

gdzie $\alpha = 14\epsilon K$

Wyznaczniki

Jeżeli zachodzi konieczność obliczenia wyznacznika

- dokonaj rozkładu macierzy $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ (z wyborem częściowym lub bez)
- zastosuj wzór:

$$\det \mathbf{A} \simeq \det \mathbf{LU} = \det \mathbf{L} \det \mathbf{U} = \det \mathbf{U} = u_{11} \ldots u_{nn}$$

Macierze odwrotne

W celu obliczenia macierzy $\mathbf{A}^{-1}$

- wyznaczamy rozkład $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$
- rozwiązujemy układy równań

$$\mathbf{LU}x^{(i)} = e^{(i)}, \;\; i = 1, \ldots, n$$

gdzie $e^{(i)} = (0, \ldots, 0, 1, 0, \ldots, 0)^{\mathrm{T}}$ jest i–tym wersorem bazowym w przestrzeni $\mathcal{R}^n$

Rozwiązania $x^{(i)}$ są kolumnami macierzy odwrotnej, przy czym należy ustawić je w kolejności wynikającej z przestawień wierszy macierzy

Przykład

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix}^{-1}$$

Szukamy rozkładu $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Zamieniamy pierwszy wiersz z drugim, następnie obliczamy

$$u_{11} = 3, \quad u_{12} = 3, \quad u_{13} = 0$$
$$l_{21} = \frac{1}{3}, \quad l_{31} = 0,$$

i wpisujemy wyniki do macierzy wyjściowej

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ \frac{1}{3} & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}$$

Zamieniamy miejscami wiersz drugi z trzecim, obliczamy

$$u_2 = 2, \qquad u_{23} = 2$$
$$l_{32} = -\frac{1}{2}$$

wyniki wpisujemy do macierzy

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Obliczamy

$$u_{33} = 2$$

aby ostatecznie otrzymać

$$\begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 3 \\ 1 \end{pmatrix}$$

W drugim etapie rozwiązujemy równania $\mathbf{LU}x^{(i)} = e^{(i)}$, tzn.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} x^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{itd.}$$

Rozwiązania mają postać

$$x^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} \\ \frac{1}{6} \\ -\frac{1}{6} \end{pmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}, \quad x^{(3)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

W wektorze przestawień $(231)^{\mathrm{T}}$ numer 1 zajmuje trzecią pozycję, więc w macierzy odwrotnej jako pierwszą kolumnę ustawiamy $x^{(3)}$, numer 2 zajmuje pierwszą pozycję, więc jako drugą kolumnę bierzemy $x^{(1)}$ i na końcu $x^{(2)}$. Stąd

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

Sprawdźmy, czy rzeczywiście powyższa macierz jest macierzą odwrotną macierzy $\mathbf{A}$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 3 & 3 & 0 \\ 0 & 2 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{6} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{1}{2} & \frac{1}{6} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{6} & \frac{1}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1 & \frac{1}{6}-\frac{1}{6}=0 & -\frac{1}{4}+\frac{1}{4}=0 \\ \frac{3}{2}-\frac{3}{2}=0 & \frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1 & -\frac{3}{4}+\frac{3}{4}=0 \\ -1+1=0 & \frac{1}{3}-\frac{1}{3}=0 & \frac{1}{2}+\frac{1}{2}=1 \end{pmatrix}$$

Oszacowanie błędu:

$$\frac{\|\delta\mathbf{A}^{-1}\|}{\|\mathbf{A}^{-1}\|} \leq \frac{\alpha}{1-\alpha}, \quad \alpha = \epsilon K O\left(\frac{9}{2}n^3\right)$$