Rozwiązywanie układów równań liniowych

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\qquad\qquad \ldots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \ldots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \ldots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$Ax = b, \qquad det\, A \neq 0$$

Układy trójkątne

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}} \left[b_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} x_k \right], \qquad i = n, n-1, \ldots, 1$$

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

$$x_i = \frac{1}{l_{ii}} \left[b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} x_k \right], \qquad i = 1, 2, \ldots, n$$

Schemat eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

$$A^{(1)} = \begin{bmatrix} A & b \end{bmatrix}$$

Postępowanie w *k*-tym kroku $A^{(k)} \rightarrow A^{(k+1)}$

1. Wybrać *r*:

$$\left|a_{rk}^{(k)}\right| = \max_{k \le i \le n} \left|a_{ik}^{(k)}\right|$$

2. Przestawić wiersze k i r, przestawienie zapamiętać

3. Obliczyć

$$m_{i,k} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \qquad i = k+1, k+2, \ldots, n$$

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)},$$

4. Obliczyć $\qquad i = k+1, k+2, \ldots, n$

$$j = k+1, k+2, \ldots, n+1$$

Ostatecznie

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \cdots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{21}^{(2)} & \cdots & a_{2n}^{(2)} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \cdots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ m_{31} & m_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{n1} & m_{n2} & \cdots & m_{nn-1} & 1 \end{bmatrix}$$

Sumy kontrolne:

$$s_i^{(1)} := \sum_{j=1}^{n+1} a_{ij}^{(1)}, \qquad i = 1,2,3,\ldots,n \qquad A^{(1)} = \begin{bmatrix} A & b & s \end{bmatrix}$$

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)}, \quad i = 2,3,\ldots,n, \quad j = 2,3,\ldots,n+2$$

$$s_i^{(2)} = s_i^{(1)} - m_{i1} s_1^{(1)}, \quad i = 2,3,\ldots,n$$

$$s_i^{(2)} = \sum_{j=1}^{n+1} a_{ij}^{(1)} - m_{i1} \sum_{j=1}^{n+1} a_{1j}^{(1)} = \sum_{j=1}^{n+1} \left[a_{ij}^{(1)} - m_{i1} a_{1j}^{(1)} \right] = \sum_{j=1}^{n+1} a_{ij}^{(2)}, \quad i = 2,3,\ldots,n$$

Rozkład trójkątny

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad A_k = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix}$$

Twierdzenie:

Jeśli $\det A_k \neq 0, \quad k = 1,2,...,n-1$, **to istnieje dokładnie jeden rozkład**

$$A = LU$$

taki, że L **jest macierzą trójkątna dolną z jedynkami na przekątnej , a** U **jest macierzą trójkątna górną.**

Macierzowy zapis eliminacji Gaussa bez wyboru elementu głównego

$$\boldsymbol{A^{(1)} = A, \quad A^{(i+1)} = L_i A^{(i)}}$$

$$\boldsymbol{L_i =} \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \cdots & \boldsymbol{-m_{i+1,i}} & \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \boldsymbol{-m_{n,i}} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{1} \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \\ \\ \cdots \boldsymbol{i} \\ \\ \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{cccccc} & & \vdots & & & \\ & & \boldsymbol{i} & & & \end{array} & \end{array}$$

$$L_i^{-1} = \begin{array}{cc} \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \cdots & m_{i+1,i} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & m_{n,i} & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} & \begin{array}{l} \\ \\ \cdots i \\ \\ \\ \\ \end{array} \\ \begin{array}{cccccc} & & \vdots & & & \\ & & i & & & \end{array} & \end{array}$$

$$\boldsymbol{U = L_{n-1} L_{n-2} \cdots L_1 A = \tilde{L} A \quad \Rightarrow \quad A = \tilde{L}^{-1} U = LU}$$

Jeżeli w trakcie eliminacji Gaussa wykonano przestawienia wierszy, to

$$\boldsymbol{LU = \tilde{A}}$$

gdzie $\tilde{A}$ powstała z A przez przestawienia tych samych wierszy.

Zastosowania rozkładu trójkątnego:

Rozwiązywanie układu równań liniowych *Ax=b*

$$A^{(1)} = [A \quad b]$$

$\rightarrow$ El. Gaussa $\rightarrow$ 1trójkątny układ r-nań $\rightarrow$ x

Inaczej:

1) $A \rightarrow$ El. Gaussa, wyznaczenie macierzy L i U zapamiętanie przestawień wierszy

2) wykonanie takich samych przestawień wierszy wektora b

$$b \rightarrow \tilde{b}$$

3) $LUx = \tilde{b}$, czyli $Ly = \tilde{b}$ i $Ux = y$ 2 trójkątne układy równań do rozwiązania

Obliczanie wyznacznika

Jeżeli s to liczba wykonanych przestawień wierszy to:

$$\det A = (-1)^s \det \tilde{A} = (-1)^s \det(LU) = (-1)^s a_{11}^{(1)} a_{22}^{(2)} \cdots a_{nn}^{(n)}$$

Odwracanie macierzy:

Sposób 1:

$$X = [x_1 \vdots \quad x_2 \vdots \quad \cdots \quad \vdots x_n] := A^{-1}$$

$$I = [e_1 \vdots \quad e_2 \vdots \quad \cdots \quad \vdots e_n] := \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$Ax_j = e_j$$

$[A \quad I]$ $\rightarrow$ **el. Gaussa** $\rightarrow$ n **trójkatnych układów r-nań** $\rightarrow$ A^{-1}

Sposób 2:

$$A^{-1} = (LU)^{-1} = U^{-1}L^{-1}$$

$$(L^{-1})_{ij} = \frac{1}{m_{ii}}\left[\delta_{ij} - \sum_{k=j}^{i-1} m_{ik}(L^{-1})_{kj}\right] \quad i = j, j+1,\dots,n$$

$$(U^{-1})_{ij} = \frac{1}{u_{ii}}\left[\delta_{ij} - \sum_{k=j}^{i-1} (U)_{ik}(U^{-1})_{kj}\right] \quad i = j, j-1,\dots,1$$

$$\delta_{i,j} = \begin{cases} 1 & i = j \\ 0 & i \neq j \end{cases}$$

$$\tilde{A} = LU \;\rightarrow\; \tilde{A}^{-1} = (LU)^{-1} = U^{-1}L^{-1}$$

A^{-1} powstaje z $\tilde{A}^{-1}$ przez analogiczne do wykonanego przestawienia wierszy przestawienie kolumn

Złożoność obliczeniowa eliminacji Gaussa

$$\sum_{k=1}^{n-1} k = \frac{n(n-1)}{2}, \quad \sum_{k=1}^{n-1} k^2 = \frac{n(n-1)(2n-1)}{6}$$

Rozwiązanie trójkątnego układu równań:

Mnożeń: $N_{T*} \approx \sum_{k=1}^{n} k = \frac{n(n+1)}{2} = \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n$**,**

Dodawań: $N_{T+} \approx \sum_{k=1}^{n} (k-1) = \frac{n(n+1)}{2} - n = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$

Wybór elementu głównego:

n-krotne przeszukiwanie zbioru co najwyżej n liczb - złożoność obliczeniowa takiego zadania jest rzędu $O(n^2)$, operacje wykonywane w procesie porównywania liczb są znacznie szybsze od operacji arytmetycznych

Pełny wybór elementu głównego oznaczałby n-krotne przeszukiwanie zbioru co najwyżej n^2 liczb, czyli zadanie o złożoności $O(n^3)$. Poniesienie tego kosztu nie jest uzasadnione i częściowy wybór elementu głównego jest powszechnie akceptowanym standardem.

Eliminacja Gaussa:

W przedstawionych algorytmach eliminację Gaussa prowadzi się na macierzy o liczbie kolumn:

- $p = n$ (w celu otrzymania rozkładu trójkątnego macierzy),
- $p = n + 1$ (rozwiązując układ równań przez przekształcanie współczynników lewej i prawej strony macierzy dołączonej $[A\ b]$),
- $p = n + 2$ (jeżeli dodatkowo dodamy kolumnę sum kontrolnych $[A\ b\ s]$).

Łączną liczbę mnożeń i dzieleń dla $p = n$ można obliczyć jako

$$N_{GE(p=n)*} = \sum_{k=1}^{n-1}(n-k+1)(n-k) = \sum_{k=1}^{n-1}(n^2+n-(2n+1)k+k^2)$$

$$= (n^2+n)(n-1) - (2n+1)\frac{n(n-1)}{2} + \frac{n(n-1)(2n-1)}{6}$$

$$= n^3 - n - \frac{1}{2}(2n^3-n^2-n) + \frac{1}{6}(2n^3-3n^2+n) = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3},$$

dodawań: $N_{GE(p=n)+} = \frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n$.

Zwiększenie p o jeden spowoduje wzrost liczby i mnożeń i dodawań o $\Delta N = \sum_{k=1}^{n-1}(n-k) = \frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n$.

Wybierając standardową metodę rozwiązania układu równań liniowych bez sum kontrolnych ($p = n + 1$) wykonamy łącznie przy eliminacji Gaussa i rozwiązaniu trójkątnego układu równań mnożeń: $N_{GE(p=n+1)T*} = \left(\left(\frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n\right) + \left(\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n\right)\right) + \left(\frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n\right) = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$

dodawań: $N_{GE(p=n+1)T+} = \left(\left(\frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n\right) + \left(\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n\right)\right) + \left(\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n\right) = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n.$

Alternatywną metodą rozwiazywania układu równań liniowych jest wykorzystanie przeprowadzanego najpierw rozkładu trójkątnego macierzy współczynników A. Wykonamy wtedy:

mnożeń: $N_{GE(p=n)2T*} = \left(\frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{3}n\right) + \left(\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n\right) + \left(\frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{2}n\right) = \frac{1}{3}n^3 + n^2 - \frac{1}{3}n$

dodawań: $N_{GE(p=n)2T+} = \left(\frac{1}{3}n^3 - \frac{1}{2}n^2 + \frac{1}{6}n\right) + 2\left(\frac{1}{2}n^2 - \frac{1}{2}n\right) = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 - \frac{5}{6}n$

Efektywna implementacja eliminacji Gaussa nie jest prostym problemem. Istotna jest nie tylko liczba operacji arytmetycznych, ale także koszt pobrania i zapisu danych w pamięci. Na szczęście dostępne pakiety obliczeniowe oferują dobre rozwiązania i wystarczy w świadomy sposób z nich korzystać. Zwykle sprawdza się najpierw strukturę macierzy współczynników i stosuje się algorytmy dostosowane do szczególnych przypadków. Na przykład instrukcja `x=A\b` w Matlabie oznacza, że zostanie kolejno sprawdzone, czy macierz A jest prostokątna, trójkątna, trójkątna z przestawionymi wierszami, symetryczna, dodatnio określona, w postaci Hessenberga, a dopiero gdy żaden tych szczególnych przypadków nie występuje zostanie wyznaczony rozkład trójkątny metodą eliminacji Gaussa i rozwiązane dwa trójkątne układy równań. Podobnie działa funkcja `linsolve(A,b)`.

Błędy rozwiązań układu równań liniowych

Norma macierzy indukowana przez normę wektorową:

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

np. $\|x\| = \max_i |x_i|, \qquad \|A\| = \max_{i,j} |a_{i,j}|$

Niech $Ax = b, \quad (A + \delta A)(x + \delta x) = b$. **Wtedy:**

$$\delta x = -A^{-1}\delta A(x + \delta x) \quad \|\delta x\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta A\| \|(x + \delta x)\|$$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|(x + \delta x)\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\delta A\|}{\|A\|}$$

Niech $Ax = b, \quad A(x + \delta x) = b + \delta b$. **Wtedy:** $A\delta x = \delta b$

$\|\delta x\| \leq \|A^{-1}\| \|\delta b\|$ **i** $\|b\| \leq \|A\| \|x\|$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \|A^{-1}\| \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$$

Wskaźnik uwarunkowania: $cond(A) := \|A\| \|A^{-1}\|$

$n\varepsilon cond(A) \leq 0.1$ - dobre uwarunkowanie.

A = 1.2969 0.8648 0.2161 0.1441 b = 0.8642 0.1440 x=A\b x = 2.0000 -2.0000 r=b-A*x r = 1.0e-015 * 0.1110 0.0278	b1=b-[1e-8; -1e-8] x1=A\b1 x1 = 0.9911 -0.4870 r1=b-A*x1 r1 = 1.0e-008 * 1.0000 -1.0000	b2=b+[1e-8; -1e-8] x2=A\b2 x2 = 3.0089 -3.5130 r2=b-A*x2 r2 = 1.0e-007 * -0.1000 0.1000

cond(A) = 2.4973e+008

inv(A) = 1.0e+008 * 0.1441 -0.8648
-0.2161 1.2969

min(eig(A)) = 6.9396e-009, max(eig(A)) = 1.4410

2*1e-16*cond(A) = 4.9946e-008

Skalowanie

$x_j = \alpha_j x'_j$ **i** i**-te równanie mnożone przez** β_i

$$D_\alpha = diag(\alpha_i), \qquad D_\beta = diag(\beta_i)$$

$$A'x' = b', \quad A' = D_\beta A D_\alpha, \quad b' = D_\beta b, \quad x = D_\alpha x'$$

Iteracyjne poprawianie rozwiązań:

$x^{(i)}$ i**-te przybliżenie rozwiązania**

Obliczyć z podwójną precyzją $r^{(i)} = b - Ax^{(i)}$

Oszacować $10^{-k_{(i)}} > \max\limits_{1\le j\le n} \left| r_j^{(i)} \right| > 10^{-k_{(i)}-1}$

Niech $10^{k_{(i)}} v^{(i)}$ **będzie zaokrągleniem do pojedynczej precyzji** $10^{k_{(i)}} r^{(i)}$

Obliczyć w pojedynczej precyzji $w^{(i)}$**:** $Aw^{(i)} = 10^{k_{(i)}} v^{(i)}$,

$$x^{(i+1)} = x^{(i)} + 10^{-k_{(i)}} w^{(i)}$$

Wtedy $r^{(i+1)} = b - Ax^{(i+1)} = b - Ax^{(i)} - 10^{-k_{(i)}} Aw^{(i)} = r^{(i)} - v^{(i)}$

Metody iteracyjne rozwiązywania układów r. liniowych-relaksacja:

1. $x^{(i)}$ *i*-te przybliżenie rozwiązania
2. Obliczyć $r^{(i)} = b - Ax^{(i)}$
3. Znaleźć składową o największym module: $r_l^{(i)}$, element o największym module w *l*-tym wierszu macierzy A : $a_{l,j}$
4. Obliczyć $x^{(i+1)}$ zmieniając tylko *j*-tą składową w $x^{(i)}$:

$$x_j^{(i+1)} = x_j^{(i)} + \frac{r_l^{(i)}}{a_{l,j}}$$

Wtedy

$$r^{(i+1)} = b - Ax^{(i+1)} = b - Ax^{(i)} + A(x^{(i)} - x^{(i+1)}) =$$

$$= r^{(i)} - \begin{bmatrix} a_{1,j} \\ \vdots \\ a_{l,j} \\ \vdots \\ a_{l,j} \end{bmatrix} \frac{r_l^{(i)}}{a_{l,j}} \quad \Rightarrow \quad r_l^{(i+1)} = 0$$