Metody numeryczne

Laboratorium 5: Rozwiązywanie układu równań liniowych – metoda LU, rozkład Cholesky'ego

1. Podstawy

Rozkład LU polega na zapisaniu macierzy A w postaci iloczynu macierzy trójkątnej dolnej L i trójkątnej górnej U:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\,\boldsymbol{U}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix}$$

W macierzy trójkątnej dolnej L wszystkie elementy poniżej przekątnej są zerowe, natomiast w macierzy trójkątnej górnej U elementy powyżej przekątnej są zerowe. Nie każdą macierz można rozłożyć w ten sposób. Rozwiązanie układu równań $\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ po rozłożeniu macierzy $\boldsymbol{A}$ na macierze $\boldsymbol{L}$ i $\boldsymbol{U}$ składa się z dwóch etapów:

$$\boldsymbol{L}\,\boldsymbol{z} = \boldsymbol{b}$$

$$\boldsymbol{U}\,\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z}$$

Te dwa równania są łatwe do rozwiązania, ponieważ macierze $\boldsymbol{L}$ i $\boldsymbol{U}$ są macierzami trójkątnymi. Każde z takich równań można rozwiązać metodą eliminacji Gaussa.

Algorytm rozkładu LU rozpoczyna się od mnożenia macierzy:

$$a_{ij} = \sum_{s=1}^{n} l_{is}u_{sj} = \sum_{s=1}^{\min(i,j)} l_{is}u_{sj} \qquad (1)$$

Sumowanie ograniczone jest tylko do elementów l_{is} i $u_{sj} \neq 0$. W każdym k–tym kroku obliczeń, wyznaczamy jeden nowy wiersz $\boldsymbol{U}$ i jedną kolumnę $\boldsymbol{L}$. Musimy wybrać dowolną liczbę różną od zera dla jednej z liczb l_{ii} lub u_{ii}. Można np. przyjąć $l_{ii} = 1$ dla $i = 1,2,\dots,n$ i wtedy otrzymujemy macierz L jedynkową trójkątną dolną.

Podstawiając $i = j = k$ w równaniu (1) otrzymujemy:

$$a_{kk} = \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks}u_{sk} + l_{kk}u_{kk} \qquad (2)$$

Przyjmując wartość jednego z elementów np. l_{kk}, obliczamy wartość drugiego z nich u_{kk}. Dla $k = 1$ mamy:

$$l_{11} = 1$$

$$a_{11} = l_{11}\,u_{11}$$

$$u_{11} = a_{11} / l_{11} = a_{11}$$

Znając wartość obu elementów, stosujemy je do obliczania 2. wiersza macierzy $\boldsymbol{U}$ i 2. kolumny macierzy $\boldsymbol{L}$. Tak więc w k-tym kroku do obliczania elementów macierzy, stosujemy dwa następujące równania:

$$a_{kj} = \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks}u_{sj} + l_{kk}u_{kj} \qquad k+1 \le j \le n \qquad (3)$$

$$a_{ik} = \sum_{s=1}^{k-1} l_{is}u_{sk} + l_{ik}u_{kk} \qquad k+1 \le i \le n \qquad (4)$$

Jeżeli $l_{kk} \neq 0$, to z równania (3) obliczamy u_{kj}. Tak samo, jeżeli $u_{kk} \neq 0$ to z równania (4) obliczamy l_{ik}.

2. Przykład

Poniżej zamieszczono fragment sesji Matlab/Octave rozkładu LU dla macierzy 5x5. Funkcja $lu(A)$ zwraca również macierz permutacji P taką, że $A = P' * L * U$. Macierz P' jest transpozycją macierzy P. Przykład można wykorzystać do przetestowania poprawności własnego programu.

```
>> A= magic(5)
A =
   17   24    1    8   15
   23    5    7   14   16
    4    6   13   20   22
   10   12   19   21    3
   11   18   25    2    9
>> b=[1 2 3 4 5]'
b =
   1
   2
   3
   4
   5
>> [L,U,P]=lu(A)
L =
   1.0000         0         0         0         0
   0.7391    1.0000         0         0         0
   0.4783    0.7687    1.0000         0         0
   0.1739    0.2527    0.5164    1.0000         0
   0.4348    0.4839    0.7231    0.9231    1.0000
U =
   23.0000    5.0000    7.0000   14.0000   16.0000
         0   20.3043   -4.1739   -2.3478    3.1739
         0         0   24.8608   -2.8908   -1.0921
         0         0         0   19.6512   18.9793
         0         0         0         0  -22.2222
P =
Permutation Matrix
   0   1   0   0   0
   1   0   0   0   0
   0   0   0   0   1
   0   0   1   0   0
   0   0   0   1   0
>> P'*L*U
ans =
   17   24    1    8   15
   23    5    7   14   16
    4    6   13   20   22
   10   12   19   21    3
   11   18   25    2    9
>> x = U\(L\b)
x =
  -0.084295
   0.098397
   0.079487
   0.152244
  -0.015064
>> P*A*x
ans =
   1
   2
   3
   4
   5
```

3. Zadania

W dołączonych do zadania plikach „*LU_gr*.txt*” znajdują się dane do zadania. Dane należy skopiować z fragmentu oznaczonego liczbą porządkową, taką samą jak na liście obecności. Dane do zadania należy zapisać do nowego pliku tekstowego, który będzie odczytywany przez program.

Napisz program w dowolnym języku implementujący:

- wczytywanie z pliku tekstowego danych do programu: liczby niewiadomych n, współczynników równania a_{ij} i wyrazów wolnych b_i
- wypisz macierze otrzymane w kolejnych krokach algorytmu
- rozwiąż układ równań metodą LU i wypisz otrzymane rozwiązanie
- sprawdź poprawność działania algorytmu.

Literatura

[1] Kincaid, Cheney - Analiza numeryczna 2006