Obliczenia naukowe
Sprawozdanie – Lista 5
Bartosz Rzepkowski

1. Zadanie 1 – Eliminacja Gaussa

1.1 Opis algorytmu

Funkcja `Gauss` jako argumenty przyjmuje wartości A, b oraz pivot, gdzie

A - tablica zawierająca elementy macierzy A stopnia n,

b - tablica zawierająca elementy wektora b stopnia n,

pivot - zmienna o wartości true, jeżeli rozwiązujemy metodą z częściowym wyborem i false w przeciwnym razie.

Eliminacja Gaussa bez częściowego wyboru elementu głównego

Funkcja dla każdego k-tego wiersza macierzy A wykonuje następujące czynności:

- Dla każdego wiersza i od k+1 do n oblicza współczynnik I = A[i, k] / A[k, k], a następnie mnoży przez ten współczynnik wszystkie elementy wiersza k,
- Od każdego elementu wiersza i-tego odejmowana jest wartość z wiersza k-tego (będąca w tej samej kolumnie). Analogicznie od wiersza i-tego wektora b odejmowana jest wartość z k-tego wiersza (pomnożona przez współczynnik I).

Dzięki powyższej procedurze w każdym kroku zerujemy wartości w kolumnie znajdującej się pod elementem A[k, k]. W wyniku powtórzenia tego procesu n razy otrzymujemy macierz górno trójkątną.

Po otrzymaniu macierzy górno trójkątnej wykonywana jest następująca procedura:

- Obliczana jest wartość n-tego elementu wektora x (x_n) poprzez podzielenie wartości b[n] przez A[n,n],
- „Wcześniejsze” i-te elementy wektora x obliczane są według wzoru

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} A[i,j] * x[j]}{A[i,i]}$$

Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

Funkcja w każdym kroku eliminacji (dla każdego wiersza k) sprawdza, czy w danej kolumnie istnieje element o większej wartości bezwzględnej, niż aktualnie sprawdzany element przekątniowy (A[k, k]). Jeśli taka wartość zostanie znaleziona w wierszu i-tym (i = k+1, …, n), wiersze k-ty i i-ty zostają zastąpione miejscami. Zastąpione zostają również elementy k-ty i i-ty w wektorze b.

Następnie funkcja postępuje w dokładnie taki sam sposób, jak w przypadku bez częściowego wyboru elementu głównego.

2. Zadanie 2 – Rozkład LU macierzy

2.1 Opis algorytmu

Funkcja `rozkladLU` jako argumenty przyjmuje wartości A oraz pivot, gdzie

A - tablica zawierająca elementy macierzy A stopnia n,

pivot - zmienna o wartości true, jeżeli rozwiązujemy metodą z częściowym wyborem i false w przeciwnym razie.

Rozkład LU bez częściowego wyboru elementu głównego

Funkcja postępuje w dokładnie taki sam sposób co funkcja Gauss, jednak w miejsca wyzerowane w danych kolumnach wpisuje wartość współczynnika I. Otrzymana macierz lu zawiera elementy przekątniowe i nadprzekątniowe macierzy trójkątnej górnej U i elementy podprzekątniowe macierzy L.

Rozkład LU z częściowym wyborem elementu głównego

Funkcja w kazdym kroku konstrukcji macierzy LU dla elementu A[k,k] sprawdza, czy w tej samej kolumnie w wierszach od k+1 do n występuje element o większej wartości bezwzględnej, niż wartość A[k,k]. Jeśli taka wartość zostanie znaleziona w wierszu i-tym, wiersze k-ty i i-ty zostają zastąpione miejscami. Ponadto w wektorze ipvt (będący wektorem permutacji) zostają zastąpione miejscami wartości ipvt[i] z wartością ipvt[k].

Następnie funkcja postępuje w dokładnie taki sam sposób, jak w przypadku bez częściowego wyboru elementu głównego.

3. Zadanie 3 – Rozwiązanie układu równań Ax = b, gdy wyznaczony jest rozkład LU

3.1 Opis algorytmu

Funkcja `Luxb` jako argumenty przyjmuje wartości A oraz pivot, gdzie

lu – tablica n×n zawierająca rozkład LU tj. elementy przekątniowe i nadprzekątniowe macierzy trójkątnej górnej U i elementy podprzekątniowe macierzy L,

pivot - zmienna o wartości true, jeżeli rozkład LU był wyznaczany metodą z częściowym wyborem i false w przeciwnym razie,

ipvt - tablica zawierająca numery wierszy określające kolejność przestawień wierszy macierzy A,

b - tablica zawierająca elementy wektora b stopnia n.

Rozwiązanie układu równań, jeśli macierz LU została wyznaczona bez częściowego wyboru elementu głównego

Funkcja Luxb rozbija rozwiązanie układu równań Ax = b na dwie procedury – rozwiązanie układu równań Ly = b oraz Ux = y.

Obliczenie y z równania Ly = b

Pierwszy element wektora y (tzn y_1) równa się elementowi b_1. Następne elementy wektora y obliczane są w sposób podobny do obliczania kolejnych wartości x w eliminacji Gaussa tzn.

$$y_k = b_k - \sum_{i=1}^{k} L[k,i] * y[i] \quad \text{, gdzie k = 2, 3, …, n.}$$

Możemy zauważyć, że wartość $b_k - \sum_{i=1}^{k} L[k,i] * y[i]$ nie jest dzielona przez żaden współczynnik z macierzy L, ponieważ jest on zawsze równy 1 (dla każdego k element L[k, k] = 1 – jest to element przekątniowy).

Obliczenie x z równania Ux = y

Postępujemy w sposób analogiczny do powyższej procedury, jednak k zamiast rosnąc od 1 do n, będzie malało od n do 1. Element x_n jest równy elementowi y_n. Następne elementy wektora x są obliczane według równania

$$x_k = \frac{y_k - \sum_{i=k+1}^{n} U[k,i] * y[i]}{U[k,k]} \quad \text{, gdzie k = n-1, n-2, …, 1.}$$

W tym przypadku element przekątniowy macierzy U nie jest równy 1, dlatego wartość $y_k - \sum_{i=k+1}^{n} U[k,i] * y[i]$ musimy podzielić przez ten element.

Rozwiązanie układu równań, jeśli macierz LU została wyznaczona z częściowym wyborem elementu głównego

Funkcja na samym początku zamienia elementy wektora b zgodnie z wektorem permutacji ipvt (np. dla ipvt = [1, 3, 2, 4] elementy b[2] i b[3] zostałyby zamienione miejscami).

Następnie funkcja postępuje identycznie jak w przypadku bez częściowego wyboru elementu głównego.

4. Zadanie 4

4.1 Opis problemu

Przetestować stworzone funkcje (tzn. rozwiązać je za pomocą eliminacji Gaussa oraz wyznaczając rozkład LU macierzy i rozwiązać układ równań Lux = b) dla następujących przypadków:

a) A = [2.0 -2.0 0.0; -2.0 0.0 2.0; 0.0 -2.0 0.0]
b = [6.0, 4.0, 2.0]

Rozwiązanie dokładne: x = [2.0, -1.0, 4.0]

b) A = [0.0 2.0 -1.0 -2.0; 2.0 -2.0 4.0 -1.0;
1.0 1.0 1.0 1.0; -2.0 1.0 -2.0 1.0]

b = [-7.0, 6.0, 10.0, -2.0]

Rozwiązanie dokładne: x = [1.0, 2.0, 3.0, 4.0]

c) A = [2.0 -2.0 0.0; -2.0 0.0 2.0; 0.0 -2.0 0.0]
b = [6.0, 0.0, -2.0]

Rozwiązane dokładne: x = [4.0, 1.0, 4.0]

W powyższych przypadkach obliczyć błędy względne otrzymanych wyników.

4.2 Wyniki

a)

Błędy względne $\frac{\|\tilde{x}-x\|}{\|x\|}$ dla wszystkich rozpatrywanych przypadków są takie same, tj.

$$\frac{\|\tilde{x}-x\|}{\|x\|}=0 \quad ,$$

a wyniki otrzymane za pomocą stworzonych funkcji są takie same, jak rozwiązanie dokładne.

b)

Standardowa eliminacja Gaussa:

$$\frac{\|\tilde{x}_1-x\|}{\|x\|}=NaN$$

Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego:

$$\frac{\|\tilde{x}_2-x\|}{\|x\|}= 0$$

Standardowy rozkład LU:

$$\frac{\|\widetilde{x}_3 - x\|}{\|x\|} = NaN$$

Rozkład LU z częściowym wyborem elementu głównego:

$$\frac{\|\widetilde{x}_4 - x\|}{\|x\|} = 0$$

Eliminacja Gaussa oraz rozkład LU z częściowym wyborem elementu głównego dały takie same wyniki, jak rozwiązanie dokładne. Funkcje bez częściowego wyboru elementu głównego dały wynik $\widetilde{x} = [NaN, NaN, NaN, NaN]$.

c)

Błędy względne $\frac{\|\widetilde{x} - x\|}{\|x\|}$ dla wszystkich rozpatrywanych przypadków są takie same, tj.

$$\frac{\|\widetilde{x} - x\|}{\|x\|} = 0 \quad ,$$

tzn. wszystkie otrzymane wyniki są takie same jak rozwiązanie dokładne.

4.3 Wnioski

Możemy zauważyć, że stworzone funkcje działają poprawnie. Podpunkt b) pokazuje, że częściowy wybór elementu głównego może umożliwić otrzymanie poprawnego wyniku, podczas gdy funkcja bez częściowego wyboru elementu głównego daje wynik błędny.

5. Zadanie 5

5.1 Opis problemu

Rozwiązać za pomocą utworzonych funkcji układ równań Ax = b dla A wygenerowanej za pomocą funkcji matcond (lista 2) oraz podać błędy względne otrzymanych wyników. Rozwiązać zadanie za pomocą eliminacji Gaussa, a następnie dwuetapowo wyznaczając macierz LU.

5.2 Wyniki

Otrzymywane wyniki oznaczane będą w następujacy sposób:

x_1 – wynik eliminacji Gaussa,
x_2 - wynik eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego,
x_3 – wynik rozwiązania z rozkładem LU,
x_4 - wynik rozwiązania z rozkładem LU z częściowym wyborem elementu głównego.

n = 5

c	$\frac{\|\widetilde{x}_1 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\widetilde{x}_2 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\widetilde{x}_3 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\widetilde{x}_4 - x\|}{\|x\|}$
1.0	9.101120538054985e-16	1.790180836524724e-16	1.1926503342248459e-15	2.2752801345137457e-16
1.0e7	2.0669912983945905e-10	4.636761438170838e-11	1.8602921643913717e-10	9.273549071328304e-11
1.0e16	1.099886670554556	0.04334528750953912	1.0286886494695522	0.1300358625286172

n = 10

c	$\frac{\|\tilde{x}_1 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_2 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_3 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_4 - x\|}{\|x\|}$
1.0	4.4631794106886355e-15	5.017053503040635e-15	4.3844673774706695e-15	8.176549499482084e-15
1.0e7	2.7218699291112005e-10	3.859006948448978e-11	2.9033290631787236e-10	9.37170768583103e-11
1.0e16	0.8477700601759703	0.6575164560072158	0.8416819448425704	0.5479303800060136

n = 20

c	$\frac{\|\tilde{x}_1 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_2 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_3 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_4 - x\|}{\|x\|}$
1.0	9.959882470769532e-15	1.162292691274871e-15	5.495435753710188e-15	9.351610926184623e-16
1.0e7	5.960510259895137e-9	5.511615152767048e-10	5.75903811851475e-9	5.672646981768689e-10
1.0e16	1.4576867757139231	0.44809568157184815	1.180238371780257	0.43223249761154137

5.3 Wnioski

Możemy zauważyć, że wraz ze wzrostem uwarunkowania macierzy c błędy względne otrzymywanych wyników są coraz większe.

6. Zadanie 6

6.1 Opis problemu

Rozwiązać za pomocą utworzonych funkcji układ równań Ax = b dla
A = [3282825675.08941 -5013081565.65267 3409304728.02911;
3256050991.27407 439858221.670267 -3005859117.97034;
-5931951819.47511 4642259422.30978 -948447572.032458]
b = [3231618621.992, 7642010299.1924, -9459784185.83823]

oraz podać błędy względne otrzymanych wyników. Rozwiązać zadanie za pomocą eliminacji Gaussa, a następnie dwuetapowo wyznaczając macierz LU.

6.2 Wyniki

Otrzymane wyniki:

Gauss(A, b, false)	2.9999987059597295	1.9999980002817843	0.9999983056246484
Gauss(A, b, true)	2.999998709031475	1.9999980050286421	0.9999983096466942
Luxb(lu, false, b, ipvt)	2.999998964767783	1.9999984002254274	0.9999986444997188
Luxb(lu, true, b, ipvt)	2.999998709031475	1.9999980050286421	0.9999983096466942

Błędy względne:

$\frac{\|\tilde{x}_1 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_2 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_3 - x\|}{\|x\|}$	$\frac{\|\tilde{x}_4 - x\|}{\|x\|}$
7.812225307554549e-7	7.793680933748821e-7	6.249780246615869e-7	7.793680933748821e-7

6.3 Wnioski

Otrzymane wyniki w bardzo małym stopniu różnią się od rozwiązania dokładnego tej macierzy (3, 2, 1). Jest to spowodowane tym, że części ułamkowych podanych liczb nie da się zapisać za pomocą skończonej liczby 0 i 1 w systemie binarnym. Przez niedokładność zapisu liczb danych w macierzy uzyskanie takiego samego wyniku jak rozwiązanie dokładne staje się niemożliwe.