v0.3.15

16.09.24

Вычислительный практикум

Практическое занятие #7.2. Метод Гаусса и разложение матрицы на множители. LU-разложение, LUP-разложение

LU-разложение

Рассмотрим метод Гаусса с более общих позиций. Рассмотрим СЛАУ

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \tag{1}$$

оно же

$$\mathbf{A}^{(0)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(0)}. \tag{2}$$

При выполнении вычислений 1-го шага исключения по схеме единственного деления система уравнений (2) приводится к виду

$$\mathbf{A}^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}, \tag{3}$$

где

$$\mathbf{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \dots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(1)} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{bmatrix}, \tag{4}$$

а коэффициенты $a_{ij}^{(1)}$, $b_i^{(1)}$, $i, j = 2, 3, \dots, n$ вычисляются по формулам

$$\mu_{i1} = \frac{a_{i1}}{a_{11}}, \quad i = 2, 3, \dots, n, \tag{5}$$

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij}^{(0)} - \mu_{i1} \cdot a_{1j}^{(0)}, \quad b_i^{(1)} = b_i^{(0)} - \mu_{i1} b_1^{(0)}, \quad i, j = 2, 3, \dots, n. \tag{6}$$

Введем в рассмотрение матрицу

$$\mathbf{M}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\mu_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\mu_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\mu_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Нетрудно проверить, что будут выполняться следующие равенства

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{M}_1\mathbf{A}^{(0)}, \quad \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{M}_1\mathbf{b}^{(0)}, \tag{8}$$

другими словами преобразование системы (2) к виду (3) эквивалентно умножению левой и правой частей системы на матрицу $\mathbf{M}_1$.

Аналогично можно показать, что вычисления 2-го шага исключения приводят систему (3) к виду

$$\mathbf{A}^{(2)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(2)}, \tag{9}$$

где

$$\mathbf{A}^{(2)} = \mathbf{M}_2\mathbf{A}^{(1)}, \quad \mathbf{b}^{(2)} = \mathbf{M}_2\mathbf{b}^{(1)}, \tag{10}$$

$$\mathbf{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \dots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & a_{n3}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(2)} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(2)} \end{bmatrix}, \tag{11}$$

$$\mathbf{M}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\mu_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & -\mu_{n2} & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}. \tag{12}$$

После $(n-1)$-го шага, завершающего прямой ход, система оказывается приведенной к виду

$$\mathbf{A}^{(n-1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(n-1)} \tag{13}$$

с верхней треугольной матрицей $\mathbf{A}^{(n-1)}$. Здесь

$$\mathbf{A}^{(n-1)} = \mathbf{M}_{n-1}\mathbf{A}^{(n-2)}, \quad \mathbf{b}^{(n-1)} = \mathbf{M}_{n-1}\mathbf{b}^{(n-2)}, \tag{14}$$

где

$$\mathbf{A}^{(n-1)} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(0)} & a_{12}^{(0)} & a_{13}^{(0)} & \ldots & a_{1n}^{(0)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \ldots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \ldots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}^{(n-1)} = \begin{bmatrix} b_1^{(0)} \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \vdots \\ b_n^{(n-1)} \end{bmatrix}, \tag{15}$$

$$\mathbf{M}_{n-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & -\mu_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}. \tag{16}$$

Заметим, что матрица $\mathbf{A}^{(n-1)}$ получена из матрицы $\mathbf{A}$ последовательным умножением на $\mathbf{M}_1, \mathbf{M}_2, \ldots, \mathbf{M}_{n-1}$:

$$\mathbf{A}^{(n-1)} = \mathbf{M}_{n-1} \ldots \mathbf{M}_2\mathbf{M}_1\mathbf{A}. \tag{17}$$

Аналогично,

$$\mathbf{b}^{(n-1)} = \mathbf{M}_{n-1} \ldots \mathbf{M}_2\mathbf{M}_1\mathbf{b}. \tag{18}$$

Из равенства (17) вытекает следующее представление:

$$\mathbf{A} = \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{M}_2^{-1} \ldots \mathbf{M}_{n-1}^{-1}\mathbf{A}^{(n-1)}. \tag{19}$$

Как легко проверить

$$\mathbf{M}_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{n1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{M}_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mu_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \mu_{n2} & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad \dots,$$

$$\mathbf{M}_{n-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \mu_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}. \tag{20}$$

Для этого достаточно перемножить матрицы $\mathbf{M}_k^{-1}$ и $\mathbf{M}_k$, в результате получим единичную матрицу.

Введем обозначения

$$\mathbf{U} = \mathbf{A}^{(n-1)}, \quad \mathbf{L} = \mathbf{M}_1^{-1}\mathbf{M}_2^{-1}\dots\mathbf{M}_{n-1}^{-1}, \tag{21}$$

таким образом

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \mu_{31} & \mu_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mu_{n1} & \mu_{n2} & \mu_{n3} & \dots & 1 \end{bmatrix}. \tag{22}$$

Тогда равенство (19) в этих обозначениях имеет вид

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}. \tag{23}$$

Имея матрицы $\mathbf{L}$ и $\mathbf{U}$ исходная система (1) записывается в виде

$$\mathbf{L}\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{b}. \tag{24}$$

Система (24) может быть решена в два шага. На первом шаге решается система

$$\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}. \tag{25}$$

На втором шаге решается система

$$\mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{y}. \tag{26}$$

Поскольку матрицы $\mathbf{L}$ и $\mathbf{U}$ — являются треугольными матрицами, системы (25) и (26) решаются обратным ходом. Таким образом число арифметических операций для их решения будет составлять $2n^2$.

Вычисление определителя матрицы

Имея $\mathbf{LU}$-разложение матрицы $\mathbf{A}$ можно легко вычислить ее определитель

$$\begin{gathered}\det \mathbf{A} = \det(\mathbf{LU}) = \det \mathbf{L} \det \mathbf{U} = \\ = \left(\prod_{i=1}^{n} \mathbf{L}_{ii}\right)\left(\prod_{i=1}^{n} \mathbf{U}_{ii}\right) = 1 \cdot \left(\prod_{i=1}^{n} \mathbf{U}_{ii}\right).\end{gathered} \tag{27}$$

Целесообразность метода

Рассмотрим линейное интегральное уравнение вида

$$\int_a^b K(x,s)\, z(s)\, ds = u(x), \quad x \in [a,b], \tag{28}$$

для которого: $z(x)$ — неизвестная функция; $K(x,s)$ — заданная функция, непрерывная на квадрате $\Pi = \{(x,s) \mid a \leqslant x \leqslant b, a \leqslant s \leqslant b\}$; $u(x)$ — заданная правая часть интегрального уравнения.

Пусть требуется найти решение уравнения (28), причем его правая часть $u(x)$ известна с некоторыми погрешностями (шумами) и обозначена $\tilde{u}(x)$,

$$\|u(x) - \tilde{u}(x)\| < \varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ — величина, характеризующая уровень погрешности.

Пример

Рассмотрим задачу определения спектрального состава излучения (электромагнитного, типа γ-излучения, или рентгеновского, или корпускулярного).

Пусть интересующее нас излучение неоднородно и распределение плотности числа частиц (фотонов), характеризуется функцией $z(s)$ (s — частота или энергия). Пропуская это излучение через измерительный прибор, мы получаем экспериментальный спектр $u(x)$ (x может быть частотой или энергией). Если измерительная аппаратура линейна, то функциональная связь между $z(s)$ и $u(x)$ дается формулой

$$Az \equiv \int_a^b K(x,s)\, z(s)\, ds = u(x), \tag{29}$$

где a и b — границы спектра, $K(x,s)$ — «аппаратная функция», предполагаемая известной. $K(x,s)$ представляет собой экспериментальный спектр (по x), если на измерительную аппаратуру падает монохроматическое излучение частоты (энергии) s и единичной интенсивности. Функцию $K(x,s)$ можно также рассматривать как отклик измерительного прибора на δ-функцию, $z = \delta(\xi - s)$.

Задача состоит в определении истинного спектра излучения $z(s)$ по экспериментальному спектру $u(x)$ и сводится к решению уравнения (29) относительно $z(s)$.

Рассмотрим математическую модель, задаваясь функцией $\overline{z}(s)$ и аппаратной функцией $K(x,s)$, близкими к функции $z_{exact}(s)$ и аппаратной функции в соответствующих практических задачах.

Решая прямую задачу, вычислим «экспериментальный» спектр $\overline{u}(x) = \int_a^b K(x,s)\,\overline{z}(s)\,ds$ на сетке по x: $\{x_1, x_2, \ldots, x_n\}$. Моделируя процесс появления случайных ошибок при измерении экспериментального спектра $u(x)$, заменим $\overline{u}(x_i)$ на $\tilde{u}(x_i)$ по формулам

$$\tilde{u}(x_i) = \overline{u}(x_i)\left(1 + \theta_i \sqrt{\frac{3(b-a)}{b^3 - a^3}}\sigma\right), \tag{30}$$

где θ_i — случайные числа из промежутка $(-1, 1)$ с равномерным законом распределения. Очевидно, что среднее значение $\tilde{u}(x_i)$ равно $\overline{u}(x_i)$ и дисперсия $\tilde{u}(x_i)$ равна σ. Величина квадратического отклонения

$$\|\tilde{u}(x) - \overline{u}(x)\| = \left\{\int_a^b \left[\tilde{u}(x) - \overline{u}(x)\right]^2\right\}^{\frac{1}{2}} \approx \left[3\sigma^2 \frac{1}{n}\sum_i \theta_i^2\right]^{\frac{1}{2}} = \sigma \tag{31}$$

является характеристикой точности исходных данных.

Возьмем в качестве $\overline{z}(s)$ некоторую функцию, а

$$K(x,s) = \left(1 - \frac{s}{x}\right)\eta(x-s),$$

где $\eta(x-s)$ — единичная функция. Берем $a=0$, $b=11$. Вычисляем

$$\overline{u}(x) = \int_0^{11} K(x,s)\,\overline{z}(s)\,ds. \tag{32}$$

Затем решаем уравнения

$$\int_0^{11} K(x,s)\,z(s)\,ds = \overline{u}(x) \tag{33}$$

относительно $z(s)$.

Заменяем последнее уравнение СЛАУ

$$\sum_{i=1}^{n} A_i K(x_i, x_j)\,z(x_j) \approx \overline{u}(x_i), \tag{34}$$

аппроксимируя интеграл некоторой квадратурной формулой.

LUP-разложение

LUP-разложение учитывает перестановки, когда осуществляется выбор главного элемента. В таком случае, матрица **A** может быть представлена в виде

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU}, \tag{35}$$

где матрица **P** — матрица перестановок, получаемая путем осуществления перестановок в единичной матрице.

Задание

Используя наработки из предыдущей практической работы, модифицировать программу, выполняющую метод Гаусса, в том числе:

- Определить матрицы **U** и **L**, осуществить промежуточный вывод и проверку. Реализовать решение СЛАУ согласно (23)–(26). Посчитать определитель.

- Определить матрицы $\mathbf{U}$, $\mathbf{L}$ и $\mathbf{P}$. Реализовать решение СЛАУ.

- Решить систему вида (24) несколько раз, используя различные правые части. Для моделирования правых частей рекомендуется использовать вектор $\mathbf{x}$, элементы которого имеют плотность

$$f_{\mathbf{x}}(x) = \begin{cases} \dfrac{1}{b-a}, & x \in [a,b] \\ 0, & x \notin [a,b] \end{cases}, \tag{36}$$

  $a = -10, b = 10$.

- Сравнить число арифметических операций.

Список литературы

[1] Лебедева А. В., Пакулина А. Н. Практикум по методам вычислений. Часть 1. Учебно-методическое пособие. СПб.: Санкт-Петербургский государственный университет, 2021. 156 с.

[2] Мысовских И. П. Лекции по методам вычислений: Учебное пособие. СПб.: Издательство Санкт-Петербургского университета, 1998. 472 с.

[3] Фаддеев Д. К., Фаддеева В. Н. Вычислительные методы линейной алгебры. М.: Государственное издательство физико-математической литературы, 1960. 655 с.

[4] Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач. Учебное пособие для вузов. Изд. 3-е, исправленное. М.: Наука, 1986. 288 с.