Sprawozdanie | Lista 5

Illia Azler | 239537

Celem listy było rozwiązanie problemu, który sprowadza się do rozwiązywania układu równań linowych, gdzie:

$$Ax = b$$

mówimy tutaj o układzie równań, w którym macierz A zawiera współczynniki przypisane do zmiennych x, wektor to konkretna reprezentacja rozwiązania tego układu równań, a wektor b przechowuje wartości prawych stron równań.
Macierz A jest nieosobliwa, to znaczy, że spełnione następne założenia:

- Istnieje odwrotność macierzy A
- Wyznacznik jest różny od zera
- Wiersze macierzy A tworzą bazę przestrzeni $\mathbb{R}^n$
- Kolumny macierzy A tworzą bazę przestrzeni $\mathbb{R}^n$
- Odwzorowanie $\mathbb{R}^n$ na $\mathbb{R}^n$ określone przez macierz A jest iniekcją (jest wzajemnie jednoznaczne)
- Odwzorowanie $\mathbb{R}^n$ na $\mathbb{R}^n$ jest suriekcją (odwzorowanie „na")
- Z równości $Ax = 0$ wynika, że $x = 0$
- Dla każdego $b \in \mathbb{R}^n$ istnieje <u>dokładnie jedno</u> x $\in \mathbb{R}^n$ takie, że $Ax = b$
- Macierz A jest iloczynem macierzy elementarnych

Również badana macierz A jest rzadką, tj. mającą dużą elementów zerowych i blokową o następującej strukturze:

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{C}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \boldsymbol{B}_2 & \boldsymbol{A}_2 & \boldsymbol{C}_2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{B}_3 & \boldsymbol{A}_3 & \boldsymbol{C}_3 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \boldsymbol{B}_{v-2} & \boldsymbol{A}_{v-2} & \boldsymbol{C}_{v-2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \boldsymbol{B}_{v-1} & \boldsymbol{A}_{v-1} & \boldsymbol{C}_{v-1} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \boldsymbol{B}_v & \boldsymbol{A}_v \end{pmatrix},$$

$\mathrm{v} = \frac{\mathrm{n}}{\mathrm{l}}$ (n jest podzielne przez l) jest iteratorem bloków A_k, B_k, C_k;
l jest rozmiarem każdego z bloków (podmacierzy);
n jest rozmiarem całej macierzy A;
A_k – jest macierzą gęstą:

$$A_k = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2k} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{k1} & a_{k2} & \cdots & a_{kk} \end{bmatrix}$$

0 – jest kwadratową macierzą zerową stopnia l;
B_k – jest macierzą i ma tylko jedną ostatnią kolumnę niezerową o następującej postaci:

$$\boldsymbol{B}_k = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & b_1^k \\ 0 & \cdots & 0 & b_2^k \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & b_\ell^k \end{pmatrix}$$

C_k – jest macierzą diagonalną o następującej postaci:

$$\boldsymbol{C}_k = \begin{pmatrix} c_1^k & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & c_2^k & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & c_{\ell-1}^k & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & c_\ell^k \end{pmatrix}$$

<u>Zadanie 1:</u>
Celem zadania było napisanie funkcji rozwiązującej układ $Ax = b$ metodą eliminacji Gaussa uwzględniającą specyficzną postać macierzy A dla dwóch wariantów:

a) bez wyboru elementu głównego,
b) z częściowym wyborem elementu głównego.

<u>Implementacja zadania:</u>

a) Idea algorytmu rozkładu dla eliminacji Gaussa bez wyboru elementu głównego jest następująca:
Macierz $A^{(k)}$ powstaje w $(k-1)$-szym kroku. Linie obramowują k-ty wiersz i poprzedzają k-tą kolumnę, wyróżnione w tym kroku:

$$\left[\begin{array}{ccc|ccccc} a_{11}^{(k)} & \cdots & a_{1,k-1}^{(k)} & a_{1k}^{(k)} & \cdots & a_{1j}^{(k)} & \cdots & a_{1n}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & a_{k-1,k-1}^{(k)} & a_{k-1,k}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,j}^{(k)} & \cdots & a_{k-1,n}^{(k)} \\ \hline 0 & \cdots & 0 & a_{kk}^{(k)} & \cdots & a_{kj}^{(k)} & \cdots & a_{kn}^{(k)} \\ \hline 0 & \cdots & 0 & a_{k+1,k}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,j}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{ik}^{(k)} & \cdots & a_{ij}^{(k)} & \cdots & a_{in}^{(k)} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nk}^{(k)} & \cdots & a_{nj}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{array}\right]$$

Naszym celem jest wyjaśnić jak $A^{(k+1)}$ wynika z $A^{(k)}$. Aby otrzymać zera w k-tej kolumnie pod elementem głównym akk, odejmujemy odpowiednie wielokrotności k-tego wiersza od wierszy leżących niżej

$$a_{ij}^{(k+1)} := \begin{cases} a_{ij}^{(k)} & (i \leqslant k) \\ a_{ij}^{(k)} - (a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)})a_{kj}^{(k)} & (i \geqslant k+1,\ j \geqslant k+1) \\ 0 & (i \geqslant k+1,\ j \leqslant k). \end{cases}$$

Dlatego przyjmujemy, że $U = A^{(n)}$ i określamy L wzorem:

$$l_{ik} = \begin{cases} a_{ik}^{(k)}/a_{kk}^{(k)} & (i \geqslant k+1) \\ 1 & (i = k) \\ 0 & (i \leqslant k-1). \end{cases}$$

Równość $A = LU$ z macierzą jedynkową trójkątną dolną L i trójkątną górną U opisuje standartowy rozkład Gaussa macierzy A.

Ogólnie mówiąc idea polega na wyzerowaniu dolnej częś macierzy pod przekątnej, aby utworzyć macierz trójkątną górną, którą nazywamy U. Macierz L w swojej kolei jest macierzą trójkątną dolną, która jest wypełniona odwrotnie do macierzy U, czyli wyżej przekątnej ma same zera oraz ma w swojej wypełnionej części dolnej mnożniki, dzięki którym wyzerowaliśmy macierz A po przekątnej i utworzyliśmy macierz U. Na przekątnej macierzy L mamy zawsze same jedynki. Jeśli wszystkie elementy główne $a_{kk}^{(k)}$ obliczane w opisany niżej sposób są różne od 0, to $A = LU$

- 1 pętla: Począwszy od pierwszej kolumny $(k = 1)$ do przedostatniej $(n - 1)$, iterujemy po kolumnach.
- 2 pętla: Iterujemy po wierszach, które znajdują się poniżej przekątnej
- Obliczamy współczynnik z, w taki sposób, aby element $A[i, k]$ stał się zerem (wyeliminowanie elementu $A[i, k]$)
- Ustawiamy $A[i, k]$ na zero, eliminując element poniżej przekątnej
- 3 pętla: Aktualizujemy elementy w bieżącym wierszu (i) i kolumnach powyżej przekątnej
- Aktualizujemy również odpowiedni element wektora b

Opisany algorytm reprezentuje poniższy pseudokod (zródło: [1] D. Kincaid, W. Cheney, Analiza numeryczna, WNT, 2005. Rozwiązywanie układów równań liniowych str. 161):

```
input n, (a_ij)
for k = 1 to n − 1 do
      for i = k + 1 to n do
            z ← a_ik/a_kk
            a_ik ← 0
            for j = k + 1 to n do
                  a_ij ← a_ij − z a_kj
            end do
      end do
end do
output (a_ij)
```

Kiedy dostajemy macierz trójkątną górną, możemy znaleźć rozwiązania wektora x korzystając z następnego prostego algorytmu:

```
for i = n to 1 step −1 do
      x_i ← (b_i − Σ_{j=i+1}^{n} a_ij x_j)/a_ii
end do
output (x_i)
```

Na dole macierzy mamy równanie $a_{nn}^{(k)} x_n = b_n^{(n)}$, z którego wyznaczamy x_n. Następnie z równania powyżej wyznaczamy x_{n-1}, bo znamy już x_n poprzez odjęcie i dzielenie. Kontynuujemy to, dopóki nie wyznaczymy cały wektor x. Na przykład, gdyby $\mathrm{n} = 3$, to mielibyśmy następne:

- $x_3 = \frac{b_3}{a_{33}}$
- $x_2 = \frac{b_2 - a_{23}x_3}{a_{22}}$
- $x_1 = \frac{b_1 - a_{12}x_2 - a_{13}x_3}{a_{11}}$

b) Idea algorytmu rozkładu dla eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego:
Częściowy wybór elementów głównych polega na tym, że k-ty z nich jest tym spośród $n - k + 1$ elementów dolnej części k-tej kolumny macierzy $A^{(\mathrm{k})}$, który ma największą wartość bezwzględną. To określa wiersz główny. Dla częściowego używamy tablic permutacji p.

1. Tworzymy wektor permutacji p, który początkowo zawiera kolejne liczby od 1 do n.
2. Dla każdej kolumny k od 1 do $n - 1$ wykonujemy:

- Szukamy elementu o największej wartości bezwzględnej w kolumnie, zaczynając od wiersza k.
- Zamieniamy miejscami odpowiednie wiersze w wektorze permutacji p.
- Wykonujemy eliminację Gaussa z wybranym elementem głównym:
    a. Obliczamy współczynnik z (analogicznie do standardowej eliminacji).
    b. Modyfikujemy macierz A i wektor b za pomocą obliczonego współczynnika.

3. Rozwiązujemy układ równań od dołu (od ostatniego wiersza do pierwszego), używając zaktualizowanej macierzy A i wektora b oraz permutacji p

Rozważmy słabe strony standardowej eliminacji Gaussa (**podpunkt zadania (a)**):

- Elementy główne są bezpośrednio dzielone przez siebie same i wykorzystywane do eliminacji elementów poniżej.
- W przypadku, gdy element główny w danej kolumnie jest bliski zera, może wystąpić dzielenie przez bardzo małą wartość, co prowadzi do utraty dokładności numerycznej. To może prowadzić do błędów obliczeniowych, a nawet do niepowodzenia eliminacji.

Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego (**podpunkt zadania (b)**):

- Przed eliminacją w każdym kroku wybieramy element główny z całej kolumny w danym wierszu, a nie tylko z tego samego wiersza.
- Wybieramy element o największej wartości bezwzględnej, co minimalizuje ryzyko dzielenia przez bardzo małą wartość.
- Zamieniamy wiersze w celu umieszczenia wybranego elementu na przekątnej.
- Następnie kontynuujemy eliminację jak w standardowej eliminacji Gaussa.

<u>Wniosek:</u> Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego pomaga w uniknięciu problemów związanych z dzieleniem przez bliskie zera, co zwiększa stabilność numeryczną algorytmu. Jednakże, wymaga dodatkowych operacji zamiany wierszy, co wprowadza pewien narzut obliczeniowy. Algorytm eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego jest zalecany, gdy mamy do czynienia z macierzami, które mogą być bliskie osobliwości. To podejście zwiększa niezawodność algorytmu i pomaga w uzyskaniu dokładniejszych wyników

<u>Zadanie 2 i 3:</u>

Celem zadania było napisanie funkcji wyznaczającą rozkład LU macierzy A (macierz L ma jedynki na przekątnej) metodą eliminacji Gaussa uwzględniającą specyficzną postać macierzy A dla dwóch wariantów:

a) bez wyboru elementu głównego,
b) z częściowym wyborem elementu głównego.

Również z wyznaczonego rozkładu LU musieliśmy napisać funkcję rozwiązującą układ równań $Ax = b$

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix} \to \boldsymbol{LU} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & & & \ddots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & u_{n,n} \end{bmatrix}$$

$$L := \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix}, \qquad U := \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Rozwiązywanie układu równań $Ax = b$ dzieli się na dwa etapy:

- rozwiązywanie $Lz = b$ względem z,
- rozwiązywanie $Ux = z$ względem x.

Idea algorytmu jest podobna do *zadania 1*, tylko że teraz jeszcze wyliczamy macierz trójkątną dolną mnożników L, z rozwiązań której dostaniemy macierz trójkątną górną U. Opis algorytmu:

1. Utwórz macierz dolnej trójkątnej L o rozmiarze $\mathbb{R}^{n*n}$, wypełnioną zerami. Iteruj po k od 1 do $n-1$.
2. Dla każdego k-tego kroku iteracji (od 1 do $n-1$), wykonaj następujące kroki:
   1) Ustaw element $L[k,k]$ na 1.0, ponieważ są to główne elementy diagonali macierzy L.
   2) Dla każdego i-tego wiersza od $(k+1)$ do minimum$(n, k + l + 1)$, wykonaj:
   3) Oblicz współczynnik $z = U[i,k] \,/\, U[k,k]$.
   4) Ustaw $L[i,k]$ na wartość z, ponieważ to elementy dolnej trójkątnej macierzy L.
   5) Ustaw $U[i,k]$ na 0.0, ponieważ eliminujemy elementy poniżej diagonali w macierzy U.
   6) Dla każdego j-tego elementu od $(k+1)$ do minimum$(n, k + 2 * l)$, wykonaj:
      - Zmniejsz $U[i,j]$ o iloczyn $z * U[k,j]$, aby dokonać eliminacji.
3. Ustaw ostatni element $L[n,n]$ na 1.0, ponieważ to element diagonalny w ostatnim wierszu macierzy L.

4. Zwróć krotkę zawierającą macierze L i zaktualizowaną macierz U.

Po wykonaniu tego algorytmu dostajemy rozkład LU dla naszej macierzy rzadkiej A, wykonana jest klasyczna dekompozycja LU.
Wykorzystamy teraz te macierze do efektywnego rozwiązania układu równań $Ax = b$ za pomocą dwóch kroków:

- uaktualnienia wektora prawych stron zgodnie z macierzą L
- rozwiązania układu równań wstecz (podobnie jak robiliśmy w 1 zadaniu) zgodnie z macierzą U.

Opis algorytmu:

1. Dla każdego kroku iteracji od 1 do $n - 1$, wykonaj:
   a. Dla każdego i-tego wiersza od $k + 1$ do minimum$(n, k + l + 1)$, zmniejsz $b[i]$ o iloczyn $L[i, k]$ i $b[k]$. To krok uaktualnia wektor prawych stron zgodnie z macierzą dolnej trójkątnej L.
2. Dla każdego kroku iteracji od n do 1, wykonaj:
   a. Oblicz sumę sum inicjowana jako 0.0.
   b. Dla każdego j-tego elementu od $i + 1$ do minimum($n, i + l$), dodaj iloczyn $U[i, j]$ i $x[j]$ do sum.
   c. Oblicz $x[i]$ jako $(b[i] - sum)/U[i, i]$. To krok rozwiązujący układ równań wstecz.
3. Zwróć wektor x jako rozwiązanie układu równań.

<u>Częściowy wybór dla rozkładu LU:</u>

Podobnie jak w eliminacji Gaussa, dla każdego kroku iteracji wybierany jest wiersz, który ma największą wartość bezwzględną w kolumnie głównej.

Wartość bezwzględna elementu w kolumnie głównej jest porównywana dla wszystkich możliwych wierszy.

Jeśli znajdziemy wiersz o większej wartości bezwzględnej, zamieniamy miejscami odpowiednie elementy w wektorze permutacji p.

Kolumny macierzy U są aktualizowane zgodnie z algorytmem rozkładu LU, a także macierze L otrzymują odpowiednie współczynniki z dla utworzenia macierzy dolnej trójkątnej.

Rozwiązanie układu równań:

Wektor prawych stron b jest aktualizowany zgodnie z permutacją p, co odzwierciedla zmiany wprowadzone w macierzy U podczas częściowego wyboru elementu głównego.

Następnie, podobnie jak w przypadku rozkładu LU bez częściowego wyboru, układ równań jest rozwiązywany, używając macierzy dolnej trójkątnej L i górnej trójkątnej U.

Warto zauważyć, że elementy p przechowują informacje o permutacjach wierszy, co pozwala na skoordynowane modyfikacje macierzy L i U, a także wektora prawych stron b. To podejście pomaga w uniknięciu dzielenia przez zero i poprawia numeryczną stabilność algorytmu.

Wniosek: Rozkład LU stanowi efektywny sposób faktoryzacji macierzy, który pozwala przedstawić ją jako iloczyn macierzy dolnej trójkątnej L i górnej trójkątnej U. Warto rozróżnić dwie wersje tego rozkładu: z częściowym wyborem elementu głównego i bez niego.

1. **Bez częściowego wyboru elementu głównego:**
    - Ta wersja zakłada brak permutacji wierszy.
    - Elementy na przekątnej macierzy U są oryginalnymi elementami macierzy A.
    - Może być mniej stabilna numerycznie, szczególnie gdy na przekątnej występują bliskie zeru elementy.

2. **Z częściowym wyborem elementu głównego:**
    - Częściowy wybór elementu głównego wprowadza permutację wierszy oraz poprawia numeryczną stabilność algorytmu.
    - Elementy na przekątnej macierzy U mogą różnić się od oryginalnych elementów macierzy A.
    - Jest bardziej powszechnie stosowany w praktyce, zwłaszcza gdy macierz A może być źle uwarunkowana.

W kontekście rozwiązywania układów równań liniowych, szczególnie korzystne jest wykorzystanie rozkładu LU z częściowym wyborem elementu głównego. Ten wariant nie tylko poprawia stabilność numeryczną, ale również umożliwia skuteczne modyfikacje macierzy L i U, co czyni go preferowanym rozwiązaniem w praktyce inżynierskiej i naukowej.

Ogólny wniosek: Zarówno eliminacja Gaussa, jak i rozkład LU to kluczowe metody używane do rozwiązania układów równań liniowych. Obydwie metody różnią się swoimi podejściami, a wybór między nimi zależy od konkretnych potrzeb i własności macierzy.

1. **Eliminacja Gaussa:**
    - Prosta w implementacji i zrozumieniu.
    - Stosowana do rozwiązania układów równań liniowych.

- Numerycznie stabilna, ale może wymagać uwagi przy rozwiązaniu źle uwarunkowanych macierzy.
- Nie wymaga przechowywania dodatkowych macierzy (jak L i U).

2. **Rozkład LU:**

- Pozwala na faktoryzację macierzy na iloczyn macierzy dolnej trójkątnej L i górnej trójkątnej U.
- Rozkład LU z częściowym wyborem elementu głównego poprawia stabilność numeryczną.
- Bardziej elastyczna niż eliminacja Gaussa, ponieważ umożliwia efektywne rozwiązanie wielu układów równań z tą samą macierzą L i różnymi macierzami U.
- Przydatna w numerycznej analizie i algorytmach iteracyjnych.

Podsumowując, wybór między eliminacją Gaussa a rozkładem LU zależy od konkretnego kontekstu problemu. Eliminacja Gaussa może być szybsza i bardziej intuicyjna, ale rozkład LU oferuje większą elastyczność i numeryczną stabilność, szczególnie w przypadku macierzy o złym uwarunkowaniu. W praktyce, szczególnie w zadaniach naukowych i inżynierskich, rozkład LU z częściowym wyborem elementu głównego jest często preferowanym wyborem.