Damian SŁOTA

METODY OBLICZENIOWE UKŁADÓW RÓWNAŃ LINIOWYCH

część I

(notatki do wykładu)

GLIWICE 2020

Spis treści

Przedmowa

Na wykładzie omówione zostaną wybrane metody obliczeniowe dla układów równań liniowych. W szczególności będą to: metoda eliminacji Gaussa, algorytm Thomasa dla układów trójprzekątniowych, algorytm Banachiewicza rozkładu LU oraz metody iteracyjne Jacobiego i Gaussa-Seidla. Wykład został opracowany na podstawie podręczników [1–10].

Rozdział 1

Metody dokładne

Rozważać będziemy układ równań liniowych postaci:

$$\begin{cases} a_{11}\,x_1 + a_{12}\,x_2 + \ldots + a_{1n}\,x_n = b_1, \\ a_{21}\,x_1 + a_{22}\,x_2 + \ldots + a_{2n}\,x_n = b_2, \\ \vdots \\ a_{n1}\,x_1 + a_{n2}\,x_2 + \ldots + a_{nn}\,x_n = b_n, \end{cases} \tag{1.1}$$

gdzie $a_{ij}, b_i \in \mathbb{R}$, $i, j \in \{1, 2, \ldots, n\}$. Stosując zapis macierzowym powyższy układ można przedstawić następująco:

$$\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}, \tag{1.2}$$

gdzie:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

oraz:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Będziemy zakładać, że macierz **A** jest nieosobliwa ($\det \mathbf{A} \neq 0$). Wówczas powyższy układ ma jednoznaczne rozwiązanie.

1.1. Układy trójkątne

Układy równań liniowych, których macierze są macierzami trójkątnymi rozwiązuje się szczególnie łatwo. Układ z macierzą górnotrójkątną ma postać:

$$\begin{cases} u_{11}\,x_1 + u_{12}\,x_2 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + u_{1n}\,x_n & = & b_1, \\ u_{22}\,x_2 + \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots + u_{2n}\,x_n & = & b_2, \\ & \vdots & \\ u_{n-1\,n-1}\,x_{n-1} + u_{n-1\,n}\,x_n & = & b_{n-1}, \\ u_{n\,n}\,x_n & = & b_n. \end{cases}$$

Jeśli $u_{i\,i} \neq 0$, $i = 1, \ldots, n$, to niewiadome można wyznaczyć w kolejności od ostatniej do pierwszej: x_n, x_{n-1}, …, x_1, ze wzorów:

$$
\begin{aligned}
x_n &= \frac{b_n}{u_{n\,n}}, \\
x_{n-1} &= \frac{b_{n-1} - u_{n-1\,n}\, x_n}{u_{n-1\,n-1}}, \\
&\vdots \\
x_1 &= \frac{b_1 - u_{1n}\, x_n - u_{1\,n-1}\, x_{n-1} - \ldots - u_{12}\, x_2}{u_{11}}.
\end{aligned}
$$

Powyższe wzory można zapisać w bardziej zwartej postaci:

$$
x_i = \frac{b_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} u_{ij}\, x_j}{u_{ii}}, \qquad i = n, n-1, n-2, \ldots, 1. \tag{1.3}
$$

Ponieważ niewiadome znajduje się od ostatniej do pierwszej, algorytm ten nazywa się *postępowaniem odwrotnym* lub *podstawianiem wstecz.*

Układ liniowy:

$$\mathbf{L}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

o macierzy dolnotrójkątnej:

$$
\mathbf{L} = \begin{bmatrix}
l_{11} & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
l_{21} & l_{22} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
l_{n-1\,1} & l_{n-1\,2} & l_{n-1\,2} & \ldots & l_{n-1\,n-1} & 0 \\
l_{n1} & l_{n2} & l_{n2} & \ldots & l_{nn-1} & l_{nn}
\end{bmatrix}
$$

można rozwiązywać podobnie. Jeśli $l_{i\,i} \neq 0$ dla $i = 1, \ldots, n$, to niewiadome można wyznaczyć za pomocą *postępowania wprzód*:

$$
x_i = \frac{b_i - \sum\limits_{j=1}^{i-1} l_{ij}\, x_j}{l_{ii}}, \qquad i = 1, 2, 3, \ldots, n. \tag{1.4}
$$

Algorytm (dla macierzy górnotrójkątnej)

1. Dane: macierz $\mathbf{U}$;
   wektor $\mathbf{b}$.

2. Dla $i = n, n-1, n-2, \ldots, 1$ obliczamy:

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}}\Big(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij}\, x_j\Big).$$

3. Wynikiem jest wektor $\mathbf{x}$ o współrzędnych $x_1, x_2, \ldots, x_n$.

Przykład 1.1. *Rozwiązać układ równań:*

$$\begin{cases} 2\,x_1 + 3\,x_2 - 4\,x_3 = 1, \\ \qquad 7\,x_2 + 10\,x_3 = 17, \\ \qquad\qquad 4\,x_3 = 4. \end{cases}$$

Rozwiązanie. Zgodnie ze wzorami (1.3) obliczamy:

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{4}{4} = 1, \\ x_2 &= \frac{17 - 10\,x_3}{7} = 1, \\ x_1 &= \frac{1 + 4\,x_3 - 3\,x_2}{7} = 1. \end{aligned}$$

Ostatecznie więc rozwiązaniem jest wektor:

$$\mathbf{x} = (1, 1, 1)^T.$$

□

1.2. Eliminacja Gaussa

Najważniejszą z metod bezpośredniego rozwiązywania dowolnych układów równań liniowych jest *eliminacja Gaussa*. Pomysł w niej zastosowany polega na eliminacji niewiadomych z kolejnych równań w pewien systematyczny sposób. Daje to układ trójkątny, który możemy bez problemu rozwiązać.

Oznaczmy:

$$\mathbf{A}^{(1)} = \mathbf{A}, \qquad \mathbf{b}^{(1)} = \mathbf{b}.$$

Mamy więc układ postaci:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}\, x_1 + a_{12}^{(1)}\, x_2 + \ldots + a_{1n}^{(1)}\, x_n = b_1^{(1)}, \\ a_{21}^{(1)}\, x_1 + a_{22}^{(1)}\, x_2 + \ldots + a_{2n}^{(1)}\, x_n = b_2^{(1)}, \\ \vdots \\ a_{n1}^{(1)}\, x_1 + a_{n2}^{(1)}\, x_2 + \ldots + a_{nn}^{(1)}\, x_n = b_n^{(1)}. \end{cases}$$

Załóżmy teraz, że $a_{11}^{(1)} \neq 0$. Wtedy z ostatnich $n-1$ równań możemy wyeliminować niewiadomą x_1 odejmując od i-tego równania pierwsze równanie pomnożone przez:

$$l_{i1} = \frac{a_{i1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \qquad i = 2, 3, \ldots, n.$$

Przekształcony układ przyjmuje postać:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}\, x_1 + a_{12}^{(1)}\, x_2 + \ldots + a_{1n}^{(1)}\, x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}\, x_2 + \ldots + a_{2n}^{(2)}\, x_n = b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad a_{32}^{(2)}\, x_2 + \ldots + a_{3n}^{(2)}\, x_n = b_3^{(2)}, \\ \qquad\qquad \vdots \\ \qquad\qquad a_{n2}^{(2)}\, x_2 + \ldots + a_{nn}^{(2)}\, x_n = b_n^{(2)}, \end{cases}$$

gdzie nowe współczynniki są dane wzorami:

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(2)} &= a_{ij}^{(1)} - l_{i1}\, a_{1j}^{(1)}, \qquad i = 2, \ldots, n, \quad j = 2, \ldots, n, \\ b_i^{(2)} &= b_i^{(1)} - l_{i1}\, b_1^{(1)}, \qquad i = 2, \ldots, n. \end{aligned}$$

Następnie z ostatnich $n-2$ równań eliminujemy zmienną x_2 odejmując od i-tego równania drugie równanie pomnożone przez (jeśli $a_{22}^{(2)} \neq 0$):

$$l_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, \qquad i = 3, 4, \ldots, n.$$

Otrzymujemy układ równań postaci:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}\, x_1 + a_{12}^{(1)}\, x_2 + \ldots\ldots\ldots + a_{1n}^{(1)}\, x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}\, x_2 + \ldots\ldots\ldots + a_{2n}^{(2)}\, x_n = b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad\qquad a_{33}^{(3)}\, x_3 + \ldots + a_{3n}^{(3)}\, x_n = b_3^{(3)}, \\ \qquad\qquad\qquad \vdots \\ \qquad\qquad\qquad a_{n3}^{(3)}\, x_3 + \ldots + a_{nn}^{(3)}\, x_n = b_n^{(3)}, \end{cases}$$

gdzie nowe współczynniki są dane wzorami:

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(3)} &= a_{ij}^{(2)} - l_{i2}\, a_{2\,j}^{(2)}, \qquad i = 3, \ldots, n, \quad j = 3, \ldots, n, \\ b_i^{(3)} &= b_i^{(2)} - l_{i2}\, b_2^{(2)}, \qquad i = 3, \ldots, n. \end{aligned}$$

Elementy $a_{11}^{(1)}$, $a_{22}^{(2)}$, $a_{33}^{(3)}$, $\ldots$ występujące w eliminacji nazywamy *elementami głównymi*. Jeśli wszystkie one są różne od zera, to możemy kontynuować eliminację aż do otrzymania po $n-1$ krokach układu równań z macierzą górnotrójkątną:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}\,x_1 + a_{12}^{(1)}\,x_2 + \ldots + a_{1n}^{(1)}\,x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad\qquad a_{22}^{(2)}\,x_2 + \ldots + a_{2n}^{(2)}\,x_n = b_2^{(2)}, \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n)}\,x_n = b_n^{(n)}, \end{cases}$$

który bez problemu możemy rozwiązać (bo $a_{ii}^{(i)} \neq 0$).

Eliminację wykonuje się w $n-1$ krokach o numerach $k = 1, 2, \ldots, n-1$. W k-tym kroku elementy $a_{ij}^{(k)}$ oraz $b_i^{(k)}$, dla $i, j > k$, przekształca się według wzorów:

$$\begin{aligned} l_{ik} &= \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \\ a_{ij}^{(k+1)} &= a_{ij}^{(k)} - l_{ik}\,a_{kj}^{(k)}, \qquad i = k+1, k+2, \ldots, n, \\ b_i^{(k+1)} &= b_i^{(k)} - l_{ik}\,b_k^{(k)}, \qquad j = k+1, k+2, \ldots, n. \end{aligned}$$

Mnożniki l_{ik}, których użyliśmy przekształcając układ, są elementami macierzy $\mathbf{L}$ jedynkowej trójkątnej dolnej:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \ldots & 1 \end{bmatrix}.$$

Każdy mnożnik występuje na pozycji tego zera w macierzy układu, do którego powstania posłużył. Końcowy układ ma macierz trójkątną górną:

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \ldots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{21}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \ldots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} & \ldots & a_{3n}^{(3)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & a_{nn}^{(n)} \end{bmatrix}.$$

Te dwie macierze tworzą rozkład LU macierzy $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\,\mathbf{U}.$$

Eliminacja Gaussa w opisanej powyżej najprostszej postaci zawodzi np. dla układów w których któryś z elementów głównych będzie równy zero. Z kolei przy obliczeniach przybliżonych mogą się pojawić nie akceptowalne wyniki, w przypadku gdy współczynnik główny będzie mały w porównaniu z innymi elementami wiersza (zobacz przykład w projekcie z laboratorium). W takiej sytuacji możemy w każdym kroku wybrać element, który będzie elementem głównym w kolejnym kroku. Możemy wówczas posłużyć się częściowym wyborem elementów głównych lub pełnym wyborem elementów głównych, ewentualnie z uwzględnieniem skal. Na ogół uważa się, że pełny wybór, oczywiście bardziej kosztowny, nie ma istotnych zalet w porównaniu z wyborem częściowym.

Przy częściowym wyborze elementu głównego w pierwszym kroku jako element główny wybieramy ten element pierwszej kolumny, który ma największą wartość bezwzględną. Ogólnie w k-tym kroku elementem głównym będzie ten spośród $n-k+1$ elementów dolnej części k-tej kolumny macierzy $\mathbf{A}^{(k)}$, który ma największą wartość bezwzględną. Jeśli jest nim element z j-tego wiersza, to możemy zamienić miejscami wiersze k-ty z j-tym i wykonać dalszą część eliminacji.

W praktyce nie przenosi się wierszy macierzy w pamięci komputera, bo to przedłuża obliczenia. Zamiast tego wybieramy inaczej wiersze główne – nie w naturalnym porządku $1, 2, \ldots, n-1$, ale kolejne wiersze o wskaźnikach $p_1, p_2, \ldots, p_{n-1}$, gdzie $(p_1, p_2, \ldots, p_{n-1}, p_n)$ jest permutacją zbioru $(1, 2, \ldots, n)$. Numer p_k wskazuje wiersz macierzy $\mathbf{A}^{(k)}$ zawierający w dolnej części k-tej kolumny element maksymalny co do wartości bezwzględnej.

Eliminację Gaussa możemy także wykorzystać do wyznaczenia wyznacznika zadanej macierzy oraz macierzy odwrotnej. W celu wyznaczenia wyznacznika macierzy $\mathbf{A}$ korzystając z algorytmu Gaussa przekształcamy daną macierz do macierzy trójkątnej i wówczas:

$$\det \mathbf{A} = \prod_{i=1}^{n} a_{ii}^{(i)}.$$

Wyznaczając macierz odwrotną zapisujemy macierz dołączoną postaci $[\mathbf{A}|\mathbf{E}]$, gdzie $\mathbf{E}$ jest macierzą jednostkową. Następnie przekształcamy (zgodnie z algorytmem Gaussa) tak aby na początku uzyskać macierz jednostkową, wówczas w drugiej części macierzy dołączonej uzyskamy macierz odwrotną: $[\mathbf{E}|\mathbf{A}^{-1}]$.

Algorytm podstawowy (bez wyboru elementów głównych)

1. Dane: macierz $\mathbf{A}$;
   wektor $\mathbf{b}$.

2. Dla $k = 1, 2, \ldots, n-1$:

   a) Dla $i = k+1, k+2, \ldots, n$:

      i) $l_{ik} = \dfrac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$,

      ii) $b_i^{(k+1)} = b_i^{(k)} - l_{ik}\, b_k^{(k)}$,

      iii) Dla $j = k+1, k+2, \ldots, n$: $a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - l_{ik}\, a_{kj}^{(k)}$.

3. Rozwiązujemy otrzymany układ z macierzą górnotrójkątną.

Przykład 1.2. *Metodą eliminacji Gaussa rozwiązać układ równań:*

$$\begin{cases} x_1 + x_2 - 2\,x_3 + x_4 = 1, \\ x_1 + 2\,x_2 + 3\,x_3 - 4\,x_4 = 2, \\ 2\,x_1 + x_2 - x_3 - x_4 = 1, \\ x_1 - x_2 + x_3 + 2\,x_4 = 3. \end{cases}$$

Rozwiązanie. Zapiszmy macierz rozszerzoną rozważanego układu:

$$[\mathbf{A}|\mathbf{b}] = \left[\begin{array}{rrrr|l} 1 & 1 & -2 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & -4 & 2 \\ 2 & 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & 2 & 3 \end{array}\right].$$

Odejmując od trzech ostatnich równań pierwsze równanie pomnożone, odpowiednio, przez:

$$l_{21} = 1, \qquad l_{31} = 2, \qquad l_{41} = 1,$$

dostajemy:

$$\left[\begin{array}{rrrr|l} 1 & 1 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 5 & -5 & 1 \\ 0 & -1 & 3 & -3 & -1 \\ 0 & -2 & 3 & 1 & 2 \end{array}\right].$$

Następnie odejmujemy od dwóch ostatnich równań drugie równanie pomnożone, odpowiednio, przez:

$$l_{32} = -1, \qquad l_{42} = -2,$$

otrzymujemy:

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 5 & -5 & 1 \\ 0 & 0 & 8 & -8 & 0 \\ 0 & 0 & 13 & -9 & 4 \end{array}\right].$$

Odejmując z kolei od ostatniego równania trzecie równanie pomnożone przez:

$$l_{43} = \frac{13}{8},$$

otrzymujemy:

$$\left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 1 & -2 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 5 & -5 & 1 \\ 0 & 0 & 8 & -8 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 4 \end{array}\right].$$

Rozwiązując otrzymany układ z macierzą górnotrójkątną obliczamy:

$$\begin{aligned} x_4 &= \frac{4}{4} = 1, \\ x_3 &= \frac{0 + 8\,x_4}{8} = 1, \\ x_2 &= \frac{1 + 5\,x_4 - 5\,x_3}{1} = 1, \\ x_1 &= \frac{1 - x_4 + 2\,x_3 - x_2}{1} = 1. \end{aligned}$$

Rozwiązanie układu równań jest więc wektor:

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

□

1.3. Algorytm Thomasa dla układów trójprzekątniowych

Rozważać będziemy trójprzekątniowy układ równań liniowych:

$$\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{d},$$

gdzie:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & a_n & b_n \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \qquad \mathbf{d} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix},$$

który możemy również zapisać w postaci:

$$a_i\, x_{i-1} + b_i\, x_i + c_i\, x_{i+1} = d_i, \qquad i = 1, 2, \dots, n, \tag{1.5}$$

gdzie przyjęto dodatkowo $a_1 = 0$ oraz $c_n = 0$.

Rozwiązania rozważanego układu szukamy w postaci:

$$x_i = \beta_i\, x_{i+1} + \gamma_i \tag{1.6}$$

lub, zapisując nieco inaczej:

$$x_{i-1} = \beta_{i-1}\, x_i + \gamma_{i-1}, \tag{1.7}$$

gdzie β_i oraz γ_i są nieznanymi współczynnikami. W celu wyznaczenia tych współczynników równanie (1.7) podstawiamy do (1.5) i wyliczamy x_i, otrzymując kolejno:

$$\begin{aligned} a_i\, \beta_{i-1}\, x_i + a_i\, \gamma_{i-1} + b_i\, x_i + c_i\, x_{i+1} &= d_i, \\ x_i \left(a_i\, \beta_{i-1} + b_i\right) &= d_i - a_i\, \gamma_{i-1} - c_i\, x_{i+1}, \end{aligned}$$

czyli:

$$x_i = -\frac{c_i}{a_i\, \beta_{i-1} + b_i}\, x_{i+1} + \frac{d_i - a_i\, \gamma_{i-1}}{a_i\, \beta_{i-1} + b_i}. \tag{1.8}$$

Porównując prawe strony równań (1.6) i (1.8) mamy:

$$\beta_i = -\frac{c_i}{a_i\, \beta_{i-1} + b_i}, \tag{1.9}$$

$$\gamma_i = \frac{d_i - a_i\, \gamma_{i-1}}{a_i\, \beta_{i-1} + b_i}. \tag{1.10}$$

Licząc β_i i γ_i z powyższych wzorów musimy znać β_{i-1} i γ_{i-1}. Aby zatem wszystkie β_i i γ_i dało się wyliczyć, musimy jeszcze określić wartości β_1 oraz γ_1. W tym celu korzystamy z równania (1.5) dla $i = 1$, otrzymując:

$$b_1\,x_1 + c_1\,x_2 = d_1 \qquad \Longrightarrow \qquad x_1 = -\frac{c_1}{b_1}\,x_2 + \frac{d_1}{b_1}.$$

Ponieważ z (1.6) dla $i = 1$ mamy, że:

$$x_1 = \beta_1\,x_2 + \gamma_1,$$

więc z ostatnich dwóch równości dostajemy:

$$\beta_1 = -\frac{c_1}{b_1},$$
$$\gamma_1 = \frac{d_1}{b_1}.$$

Żeby teraz wyznaczyć rozwiązanie korzystając ze wzoru (1.6) musimy jeszcze znać wartość x_n. W celu jej wyznaczenia do ostatniego równania w układzie (1.5) (czyli dla $i = n$):

$$a_n\,x_{n-1} + b_n\,x_n = d_n$$

wstawiamy zależność (1.7) dla $i = n$:

$$a_n\,(\beta_{n-1}\,x_n + \gamma_{n-1}) + b_n\,x_n = d_n.$$

Wyliczamy stąd szukaną wartość:

$$x_n = \frac{d_n - a_n\,\gamma_{n-1}}{a_n\,\beta_{n-1} + b_n} = \gamma_n.$$

Pozostałe x_i dla $i = n-1, n-2, \ldots, 1$, wyznaczamy teraz z zależności (1.6).

Algorytm

1. Dane: wektory **a**, **b**, **c**, **d**.

2. Liczymy:

$$\beta_1 = -\frac{c_1}{b_1}, \qquad \gamma_1 = \frac{d_1}{b_1}.$$

3. Dla $i = 2, 3, \ldots, n$ liczymy:

$$\beta_i = -\frac{c_i}{a_i\,\beta_{i-1} + b_i}, \qquad \gamma_i = \frac{d_i - a_i\,\gamma_{i-1}}{a_i\beta_{i-1} + b_i}.$$

4. Podstawiamy: $x_n = \gamma_n$.
5. Dla $i = n-1, n-2, \ldots, 1$ liczymy:

$$x_i = \beta_i\, x_{i+1} + \gamma_i.$$

6. Wynikiem jest wektor $\mathbf{x}$.

Przykład 1.3. *Przy pomocy algorytmu Thomasa rozwiązać układ równań:*

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 6 \\ 4 \\ 1 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

Rozwiązanie. Będziemy rozważać następujące wektory:

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= (0,3,1,1,2), \qquad & \mathbf{b} &= (2,1,2,1,2), \\ \mathbf{c} &= (2,1,4,1,0), \qquad & \mathbf{d} &= (2,6,4,1,4). \end{aligned}$$

Obliczamy potrzebne współczynniki:

$$\begin{aligned} \beta_1 &= -\frac{c_1}{b_1} = -\frac{2}{2} = -1, \\ \gamma_1 &= \frac{d_1}{b_1} = \frac{2}{2} = 1, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_2 &= -\frac{c_2}{a_2\beta_1 + b_2} = \frac{1}{2}, \\ \gamma_2 &= \frac{d_2 - a_2\,\gamma_1}{a_2\,\beta_1 + b_2} = -\frac{3}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_3 &= -\frac{c_3}{a_3\,\beta_2 + b_3} = -\frac{8}{5}, \\ \gamma_3 &= \frac{d_3 - a_3\,\gamma_2}{a_3\,\beta_2 + b_3} = \frac{11}{5}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \beta_4 &= -\frac{c_4}{a_4\,\beta_3 + b_4} = \frac{5}{3}, \\ \gamma_4 &= \frac{d_4 - a_4\,\gamma_3}{a_4\,\beta_3 + b_4} = 2, \end{aligned}$$

$$\beta_5 = -\frac{c_5}{a_5\,\beta_4 + b_5} = 0,$$
$$\gamma_5 = \frac{d_5 - a_5\,\gamma_4}{a_5\,\beta_4 + b_5} = 0,$$

następnie wyznaczamy niewiadome:

$$\begin{aligned} x_5 &= \gamma_5 = 0, \\ x_4 &= \beta_4\,x_5 + \gamma_4 = 2, \\ x_3 &= \beta_3\,x_4 + \gamma_3 = -1, \\ x_2 &= \beta_2\,x_3 + \gamma_2 = -2, \\ x_1 &= \beta_1\,x_2 + \gamma_1 = 3. \end{aligned}$$

Rozwiązaniem jest więc wektor:

$$\mathbf{x} = (3, -2, -1, 2, 0)^T.$$

□

1.4. Algorytm Banachiewicza rozkładu LU

W metodzie tej macierz **A** układu równań liniowych przedstawiamy w postaci iloczynu dwóch macierzy trójkątnych **L** i **U**:

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

gdzie **L** jest macierzą dolnotrójkątną, a **U** gornotrójkątną z jedynkami na głównej przekątnej:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ l_{n-1\,1} & l_{n-1\,2} & l_{n-1\,3} & \dots & l_{n-1\,n-1} & 0 \\ l_{n\,1} & l_{n\,2} & l_{n\,3} & \dots & l_{n\,n-1} & l_{n\,n} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & u_{14} & \dots & u_{1n} \\ 0 & 1 & u_{23} & u_{24} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & 1 & u_{34} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & u_{n-1\,n} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Przy takim przedstawieniu rozwiązywany układ równań ($\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$) przyjmie postać:

$$\mathbf{L}\,\mathbf{U}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}.$$

Jeśli wprowadzimy oznaczenie $\mathbf{y} = \mathbf{U}\,\mathbf{x}$, to aby rozwiązać wyjściowy układ równań musimy rozwiązać dwa układy trójkątne, a mnianowicie dolnotrójkątny układ:

$$\mathbf{L}\,\mathbf{y} = \mathbf{b}$$

oraz górnotrójkatny układ:

$$\mathbf{U}\,\mathbf{x} = \mathbf{y}.$$

W tym przypadku problem rozwiązania układu $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ sprowadza się więc do wyznaczenia rozkładu $\mathbf{LU}$. W tym celu wymnażamy macierze $\mathbf{L}$ i $\mathbf{U}$, otrzymując:

$$\mathbf{L}\,\mathbf{U} = \begin{bmatrix} l_{11} & l_{11}\,u_{12} & l_{11}\,u_{13} & \ldots & \ldots & l_{11}\,u_{1n} \\ l_{21} & l_{21}\,u_{12} + l_{22} & l_{21}\,u_{13} + l_{22}\,u_{23} & \ldots & \ldots & l_{21}\,u_{1n} + l_{22}\,u_{2n} \\ l_{31} & l_{31}\,u_{12} + l_{32} & l_{31}\,u_{13} + l_{32}\,u_{23} + l_{33} & l_{31}\,u_{14} + l_{32}\,u_{24} + l_{33}\,u_{34} & \ldots & l_{31}\,u_{1n} + l_{32}\,u_{2n} + l_{33}\,u_{3n} \\ \vdots & & & \vdots & & \\ l_{n1} & l_{n1}\,u_{12} + l_{n2} & l_{n1}\,u_{13} + l_{n2}\,u_{23} + l_{n3} & l_{n1}\,u_{14} + l_{n2}\,u_{24} + l_{n3}\,u_{34} & \ldots & l_{n1}\,u_{1n} + l_{n2}\,u_{2n} + \ldots + l_{n\,n-1}\,u_{n-1\,n} + l_{nn} \end{bmatrix}.$$

Porównując współczynniki powyższej macierzy ze współczynnikami macierzy $\mathbf{A}$ dostajemy wzory na rozkład $\mathbf{LU}$. Wzory te zostały przedstawione w poniższym algorytmie.

Algorytm Banachiewicza rozkładu LU

1. Dane: macierz $\mathbf{A}$.
2. Definiujemy macierz zerową $\mathbf{L}$ i macierz jednostkową $\mathbf{U}$.
3. Dla $i = 1, 2, \ldots, n$ liczymy $l_{i1} = a_{i1}$.
4. Dla $j = 2, 3, \ldots, n$ liczymy $u_{1j} = \dfrac{a_{1j}}{l_{11}}$.
5. Dla $j = 2, 3, \ldots, n$:

a) Dla $i = 2, 3, \ldots, j-1$ liczymy:

$$u_{ij} = \frac{1}{l_{ii}} \Big(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}\, u_{kj} \Big).$$

b) Dla $i = j, j+1, \ldots, n$ liczymy:

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}\, u_{kj}.$$

5. Wynikiem sa macierze **L** i **U**.

Przykład 1.4. *Metodą Banachiewicza rozwiązać układ równań:*

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 3 & 2 & 4 \\ 4 & 3 & 5 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

Rozwiązanie. W tym przypadku rozkład **LU** jest postaci:

$$\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} \\ 0 & 1 & u_{23} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & l_{11}\, u_{12} & l_{11}\, u_{13} \\ l_{21} & l_{21}\, u_{12} + l_{22} & l_{21}\, u_{13} + l_{22}\, u_{23} \\ l_{31} & l_{31}\, u_{12} + l_{32} & l_{31}\, u_{13} + l_{32}\, u_{23} + l_{33} \end{bmatrix}.$$

Porównując to z macierzą **A** dostajemy kolejno:

– pierwsza kolumna:

$$l_{11} = 1, \qquad l_{21} = 3, \qquad l_{31} = 4;$$

– pierwszy wiersz:

$$u_{12} = \frac{a_{12}}{l_{11}} = 1, \qquad u_{13} = \frac{a_{13}}{l_{11}} = 3;$$

– druga kolumna:

$$l_{22} = a_{22} - l_{21}\, u_{12} = -1, \qquad l_{32} = a_{32} - l_{31}\, u_{12} = -1;$$

– trzecia kolumna:

$$u_{23} = \frac{1}{l_{22}} \big(a_{23} - l_{21}\, u_{13} \big) = 5, \qquad l_{33} = a_{33} - l_{31}\, u_{13} - l_{32}\, u_{23} = -2.$$

Mamy więc rozkład:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 3 & 2 & 4 \\ 4 & 3 & 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & -1 & 0 \\ 4 & -1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Rozwiązujemy pierwszy układ trójkątny $\mathbf{L}\,\mathbf{y} = \mathbf{b}$ czyli:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 3 & -1 & 0 \\ 4 & -1 & -2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 5 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

Skąd kolejno mamy:

$$\begin{aligned} y_1 &= 3, \\ y_2 &= 4, \\ y_3 &= 1. \end{aligned}$$

Przechodzimy do drugiego układu trójkątnego $\mathbf{U}\,\mathbf{x} = \mathbf{y}$ czyli:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 3 \\ 0 & 1 & 5 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3 \\ 4 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Rozwiązując go dostajemy kolejno:

$$\begin{aligned} x_3 &= 1, \\ x_2 &= -1, \\ x_1 &= 1. \end{aligned}$$

Ostatecznie więc rozwiązaniem wyjściowego układu równań jest wektor $\mathbf{x} = (1, -1, 1)^T$. $\square$

Bibliografia

1. R.L. Burden, J.D. Faires, *Numerical Analysis*, PWS-Kent Publ. Com., Boston 1989.
2. J.P. Epperson, *An Introduction to Numerical Methods and Analysis*, Wiley Interscience, Hoboken 2007.
3. Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, *Metody numeryczne*, WNT, Warszawa 1993.
4. K. Golec-Biernat, *Metody numeryczne dla fizyków*, Kraków 2015.
5. P. Kiciak, *Matematyka obliczeniowa*, Uniwersytet Warszawski, Wydział MIM, Warszawa 2014.
6. D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*, WNT, Warszawa 2006.
7. E. Majchrzak, B. Mochnacki, *Metody numeryczne. Podstawy teoretyczne, aspekty praktyczne i algorytmy*, Wyd. Pol. Śl., Gliwice 2004.
8. A. Ralston, *Wstęp do analizy numerycznej*. PWN, Warszawa 1983.
9. J. Stoer, R. Bulirsch, *Wstęp do analizy numerycznej*, PWN, Warszawa 1987.
10. K. Tabisz, *Metody numeryczne I*, Instytut Matematyczny, Uniwersytet Wrocławski, Wrocław 2003.