

Metody Numeryczne – Sprawozdanie III

Metody rozwiązywania układów równań liniowych (wstęp teoretyczny)

Wstęp

Tematem tego sprawozdania są numeryczne metody rozwiązywania układów równań liniowych. Dokonałem w nim omówienia najbardziej znanych metod dokładnych i iteracyjnych. Praca ta składa się z dwóch części – wstępu teoretycznego oraz praktycznej implementacji omawianych zagadnień w programie Mathcad.

Szkic części teoretycznej

- Przedstawienie problemu
- Metody dokładne
 - Metoda podstawień
 - Metoda eliminacji Gaussa
 - Metoda LU
- Metody iteracyjne
 - Metoda Jacobiego
 - Metoda Gaussa-Seidla
- Wnioski praktyczne
- Bibliografia

Przedstawienie problemu

Zdarza się czasem w życiu, że potrzebujemy rozwiązać układ „szkolnych” równań liniowych. Chodzi oczywiście o układ typu:

$$\begin{cases} a_{1,1}x_1 + a_{1,2}x_2 + \dots + a_{1,n}x_n = b_1 \\ a_{2,1}x_1 + a_{2,2}x_2 + \dots + a_{2,n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{m,1}x_1 + a_{m,2}x_2 + \dots + a_{m,n}x_n = b_m \end{cases} \quad (1)$$

Gdzie m oznacza liczbę równań, a n – liczbę niewiadomych. Dla dalszych rozważań przyjmę założenie, że $m = n$, tj. równań mamy tyle samo co niewiadomych. Powyższy układ możemy też przedstawić w postaci macierzowej, tj:

$$\begin{matrix}
 \begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} & = & \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \\
 Ax = B & & & (2)
 \end{matrix}$$

Przyjąłem dodatkowo, że macierz A jest macierzą nieosobliwą (posiada wyznacznik różny od zera; z tego założenia wynika także założenie poprzednie, tj. $m = n$), co zapewnia, że układ posiada dokładnie jedno rozwiązanie. Najbardziej oczywistym sposobem rozwiązania takiego układu wydaje się przekształcenie go do postaci $x = A^{-1}b$. Niestety, operacja odwracania macierzy jest bardzo złożona obliczeniowo a spotykane w życiu układy często składają się z dużej liczby równań na dużą liczbę niewiadomych (n rzędu setek, tysięcy). Biorąc pod uwagę fakt, że powyżej $n = 3$ nie opłaca się już rozwiązywać takiego układu na papierze można wyraźnie zauważyć potrzebę wydajnych metod rozwiązywania układów równań liniowych przy użyciu komputera. Na szczęście dla nas metody takie istnieją i są szeroko stosowane w naukach technicznych. Kilka z nich omówiłem w tym sprawozdaniu.

Metody dokładne

Pierwszą grupą metod rozwiązywania układów równań liniowych są **metody dokładne**. Nazwa ta wskazuje, że przy założeniu dokładności obliczeń uzyskamy dokładne wyniki w skończonym czasie (jest to termin pokrewny z pojęciem algorytmu stabilnego numerycznie, w którym wraz ze wzrostem dokładności obliczeń wynik zmierza do rozwiązania dokładnego; niemniej metody dokładne mogą być numerycznie niestabilne ze względu na błędy zaokrągleń [1]). Zanim omówione zostaną dwie wybrane metody warto zwrócić uwagę na pewien szczególny przypadek układu równań, którego omówienie jest konieczne do zrozumienia dalszych rozważań.

Rozwiązywanie metodą podstawień

Rozważmy układ równań liniowych postaci:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n-1} & a_{1,n} \\ 0 & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n-1} & a_{2,n} \\ 0 & 0 & \cdots & a_{3,n-1} & a_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & a_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}, \quad a_{i,j} \neq 0; i, j = 1 \dots n \quad (3)$$

Widać wyraźnie, że ostatnie równanie ma postać $a_{n,n}x_n = b_n$, skąd możemy wprost odczytać wartość zmiennej x_n . Mając tę wartość, możemy wstawić ją do równania wyżej, które ma postać $a_{n-1,n-1}x_{n-1} + a_{n-1,n}x_n = b_{n-1}$, i natychmiast uzyskać wartość x_{n-1} . Postępując w ten sposób możemy szybko i bezboleśnie rozwiązać cały układ.

W powyższym przykładzie macierz A była macierzą trójkątną górną. Aby taka metoda, nazywana metodą podstawień, była możliwa do wykonania, macierz A musi być macierzą trójkątną górną

lub dolną (wspaniale byłoby, gdyby była macierzą diagonalną lub jednostkową). Jednak w praktycznych zastosowaniach macierz ta bardzo rzadko przyjmuje postać macierzy trójkątnej. Z tego względu powstał cały szereg metod służących sprowadzeniu układu równań liniowych do postaci, w której współczynniki zapisane są w macierzy trójkątnej. Umożliwia to szybkie i wygodne jego rozwiązanie. W taki właśnie sposób działają omówione poniżej metody *eliminacji Gaussa* i *LU*.

Metoda eliminacji Gaussa

Metoda ta polega na takim przekształcaniu kolejnych wierszy macierzy A , by zachowany został jej wyznacznik, a jednocześnie ona sama stała się macierzą trójkątną. Proces ten nazywamy często *etapem eliminacji zmiennych*. Na tak przekształconej macierzy stosuje się potem metodę podstawień w celu obliczenia rozwiązania. Jak przebiega etap eliminacji zmiennych?

Przyjmijmy układ postaci:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdots & a_{2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad (4)$$

Odejmując od każdego wiersza począwszy od drugiego w macierzy A wiersz pierwszy pomnożony przez współczynnik $\odot_1 = \frac{a_{i,1}}{a_{1,1}}$ (gdzie i oznacza numer wiersza) uzyskamy układ taki jak poniżej:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \cdots & a_{1,n} \\ 0 & a_{2,2} - \frac{a_{2,1}}{a_{1,1}} \cdot a_{1,2} & \cdots & a_{2,n} - \frac{a_{2,1}}{a_{1,1}} \cdot a_{1,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n,2} - \frac{a_{n,1}}{a_{1,1}} \cdot a_{1,2} & \cdots & a_{n,n} - \frac{a_{n,1}}{a_{1,1}} \cdot a_{1,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \quad (5)$$

Widzimy, że ze wszystkich równań oprócz pierwszego znikła niewiadoma x_1 . Następnie możemy odjąć od wszystkich wierszy począwszy od trzeciego wiersz drugi pomnożony przez współczynnik

$\odot_2 = \frac{a_{i,2}}{a_{2,2}}$, w wyniku czego wyeliminujemy z równań opisywanych przez te wiersze niewiadomą x_2 .

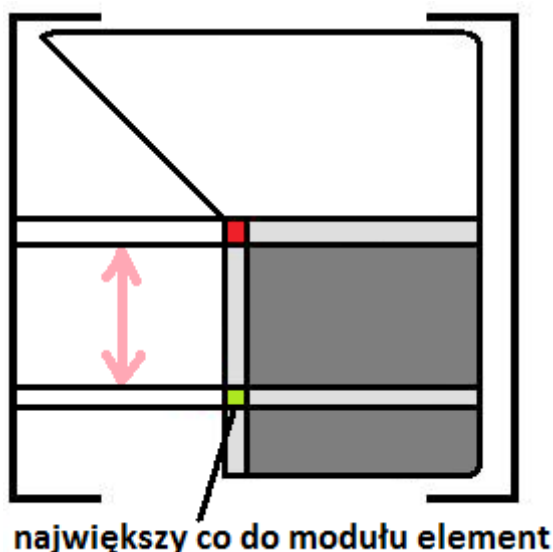
Postępując w ten sposób sprowadzimy macierz A do macierzy trójkątnej górnej.

Po chwili zastanowienia można jednak dostrzec pewien problem w tej metodzie. Co stanie się, gdy macierz A ma na diagonalu (tj. głównej przekątnej) jakąś wartość równą zero? Przy obliczaniu współczynnika \odot_i dla i -tego wiersza wystąpi dzielenie przez zero! Istnieje kilka metod radzenia sobie z takim przypadkiem; o dwóch chciałbym wspomnieć poniżej.

Częściowy i całkowity wybór elementu głównego

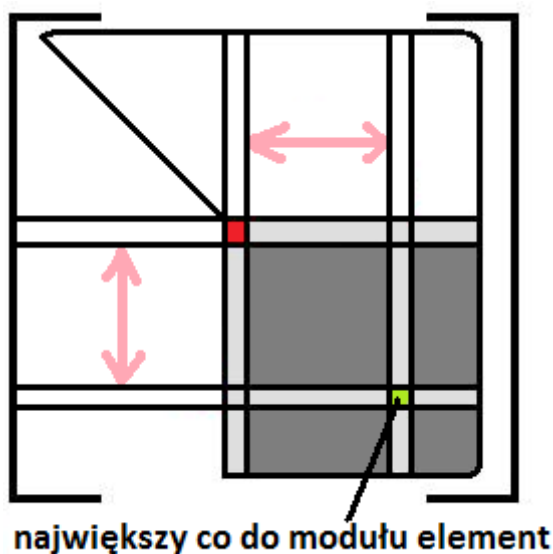
Elementem głównym dla i -tego wiersza nazywamy współczynnik w mianowniku \odot_i , tj. w przypadku klasycznej metody Gaussa współczynnik znajdujący się na diagonalu. Metoda

częściowego wyboru elementu głównego polega na odnalezieniu lepszego (np. największego co do modułu) współczynnika w części kolumny poniżej aktualnego, a następnie zamianie miejscami tych kolumn. Ilustruje to rysunek poniżej:



rys. 1. Częściowy wybór elementu głównego

Podobnie działa metoda *całkowitego wyboru elementu głównego*, przy czym w tej metodzie poszukujemy optymalnego elementu głównego nie w jednej kolumnie, ale w całej znaczącej pozostałości macierzy (rys. 2). Zamieniamy wtedy miejscami zarówno wiersze jak i kolumny.



rys. 2. Całkowity wybór elementu głównego

Przy tej metodzie należy pamiętać, że wraz ze zmianą kolejności kolumn zmienia się też kolejność rozwiązań równania.

W praktycznych zastosowaniach zazwyczaj częściowy wybór elementu głównego jest wystarczający, wybór całkowity stosuje się rzadko. Można wykazać, że oba te wybory pozwalają na przekształcenie dowolnej nieosobliwej macierzy kwadratowej do postaci trójkątnej.

Metoda rozkładu LU

Metodą pokrewną do eliminacji Gaussa jest metoda LU. Nazwa ta (z angielskiego *Lower-Upper*) zwraca uwagę na najważniejszą cechę tej metody – rozbijamy w niej macierz A na iloczyn macierzy $A=LU$, gdzie macierz L jest macierzą trójkątną dolną (ang. *Lower*, zazwyczaj z jedynkami na diagonalu) a macierz U jest macierzą trójkątną górną (ang. *Upper*). Mając już takie macierze możemy zauważyć, że uzyskanie wynikowego wektora x sprowadza się do rozwiązania poniższych dwóch równań:

$$\begin{aligned} Ly &= b \\ Ux &= y \quad (6) \end{aligned}$$

Powstaje naturalne pytanie – jak wyznaczyć macierze L i U ? Możemy tego dokonać za pomocą zmodyfikowanej metody eliminacji Gaussa lub za pomocą metody Doolittle'a.

Warto zauważyć, że po dokonaniu rozkładu LU możemy wymieniać wektory b i w ten sposób wyliczać rozwiązania układów, które różnią się jedynie wyrazami wolnymi wykonując mniej obliczeń niż w przypadku metody Gaussa, w której to przy zmianie wektora b wszystkie obliczenia muszą być wykonane na nowo.

Zmodyfikowana metoda Gaussa

Sposób ten traktuje przekształconą macierz A (która jest macierzą górną trójkątną) jako macierz U a modyfikacja polega jedynie na dodatkowym wyliczaniu współczynników macierzy L . W każdym kroku metody Gaussa (bez wyboru elementu głównego) w trakcie odejmowania i -tego wiersza pomnożonego przez współczynnik α_i od pozostałych wierszy dodatkowo wyliczamy kolejny element macierzy L :

$$L_{j,i} = \frac{a_{i,j}}{a_{i,i}} \quad (7)$$

Z tego wzoru wyraźnie wynika, że elementy na diagonalu macierzy L będą miały wartość 1. Mając to na uwadze i przypominając sobie, że przekształcona macierz A jest jednocześnie szukaną macierzą U okazuje się, że zmodyfikowany algorytm eliminacji Gaussa można zapisać w taki sposób, by wyliczył rozkład LU bezpośrednio wewnątrz macierzy A , nie zużywając tym samym dodatkowej pamięci (algorytm *in situ*). Diagonalę takiej macierzy zajmują wartości z U , gdyż jak zauważyliśmy przed chwilą, wartości na przekątnej macierzy L są równe 1. Przykład takiej implementacji znajduje się w części praktycznej tego sprawozdania.

Należy podkreślić, że modyfikujemy tu podstawową metodę Gaussa, tj. bez wyboru elementu głównego. Jak zauważono w [1], metody z wyborem elementu głównego nie zawsze prowadzą do rozkładu LU.

Metoda Doolittle'a

W metodzie Doolittle'a wartości rozkładu LU wylicza się na przemian za pomocą poniższych wzorów:

$$\begin{aligned}
 U_{i,j} &= A_{i,j} - \sum_{k=0}^{i-1} L_{i,k} U_{k,j} \quad \text{dla } j = i, i+1, \dots, n-1 \\
 L_{j,i} &= \frac{(A_{j,i} - \sum_{k=0}^{i-1} L_{j,k} U_{k,i})}{U_{i,i}} \quad \text{dla } j = i+1, i+2, \dots, n-1
 \end{aligned} \tag{8}$$

Dla przypomnienia: symbol n oznacza ilość niewiadomych w równaniu.

Podobnie jak w zmodyfikowanej metodzie Gaussa, także tutaj rozkład LU daje się wyliczyć w samej macierzy współczynników A metodą *in situ*.

Metody iteracyjne

Iteracyjne metody rozwiązywania układów równań liniowych startują z pewnego przybliżenia początkowego, które w kolejnych krokach poprawiają. Pozwalają nam one czasami jeszcze bardziej przyspieszyć wyliczenie dokładnego rozwiązania. Omówione w tym sprawozdaniu metody należą do rodziny metod iteracyjnych postaci:

$$x^{(i+1)} = B \cdot x^{(i)} + c \tag{9}$$

Metody te nie są zbieżne do rozwiązania w każdym przypadku. Przypomnę w tym miejscu pojęcie *promienia spektralnego* macierzy. Promieniem spektralnym (dalej oznaczanym symbolem σ) macierzy nazywamy jej największą co do modułu wartość własną (dokładniej: jej moduł). Omówione w tym sprawozdaniu metody iteracyjne są zbieżne do rozwiązania, gdy $\sigma(B) < 1$.

Metoda Jacobiego

Metoda ta wymaga rozbicia macierzy A na sumę trzech macierzy: poddiagonalnej (L), diagonalnej (D) i nad-diagonalnej (U). Jak nazwy wskazują, macierz diagonalna zawiera elementy jedynie na głównej przekątnej, podczas gdy macierz pod- i nad-diagonalna to odpowiednio macierz trójkątna dolna i górna z samymi zerami na głównej przekątnej. Macierze te muszą spełniać warunek:

$$A = L + D + U \tag{10}$$

Wzór iteracyjny przyjmuje wtedy postać:

$$x^{(i+1)} = -D^{-1} \cdot (L + U) \cdot x^{(i)} + D^{-1} \cdot b \tag{11}$$

Za macierz B z ogólnego wzoru omawianej rodziny metod iteracyjnych możemy przyjąć macierz $B_j = -D^{-1} \cdot (L + U)$. Warunkiem zbieżności metody Jacobiego do rozwiązania dokładnego jest, by $\sigma(B_j) < 1$. Ponadto należy zauważyć, iż macierz D musi być odwracalna, co implikuje, że macierz współczynników A nie może mieć zer na diagonalu. Macierz $c = D^{-1} \cdot b$.

Metoda Gaussa-Seidla

Metoda ta jest podobna do metody Jacobiego, jednak jest szybciej zbieżna do rozwiązania. Wzór iteracyjny można zapisać w postaci:

$$D \cdot x^{(i+1)} = -L \cdot x^{(i+1)} - U \cdot x^{(i)} + b \quad (12)$$

Na pierwszy rzut oka wzór ten może trochę niepokoić – jak mamy w łatwy sposób policzyć prawą stronę, skoro zależy ona od lewej strony? W [1] zauważono, że do wyliczenia pierwszego elementu wektora $x^{(i+1)}$ nie potrzebujemy żadnej innej jego wartości, a do wyliczenia kolejnych elementów będziemy wykorzystywać jedynie te poprzednio obliczone. Ponadto, wzór ten możemy przecież przekształcić:

$$\begin{aligned} D \cdot x^{(i+1)} &= -L \cdot x^{(i+1)} - U \cdot x^{(i)} + b && \left| -L \cdot x^{(i+1)} \right. \\ (D+L) \cdot x^{(i+1)} &= -U \cdot x^{(i)} + b && \left| \cdot (D+L)^{-1} \text{ z lewej} \right. \\ x^{(i+1)} &= -(D+L)^{-1} \cdot U \cdot x^{(i)} + (D+L)^{-1} \cdot b && (13) \end{aligned}$$

Tak przekształcone równanie możemy zaimplementować identycznie jak w przypadku metody Jacobiego. Za macierz B z ogólnego możemy przyjąć macierz $B_{gs} = -(D+L)^{-1} \cdot U$. Warunkiem zbieżności tej metody jest, by $\sigma(B_{gs}) < 1$. Macierz $D+L$ musi być odwracalna, co – podobnie jak w poprzednim przypadku – wymusza, by macierz współczynników A nie miała zer na głównej przekątnej. Macierz $c = (D+L)^{-1} \cdot b$.

Wnioski i uwagi praktyczne

- Spośród wszystkich omówionych metod najszerze zastosowanie mają metody eliminacji Gaussa z częściowym i całkowitym wyborem elementu głównego – jako jedyne działają one poprawnie gdy na diagonalu macierzy współczynników w wyniku obliczeń wystąpi zero.
- Metoda LU pozwala znacząco zmniejszyć nakład obliczeń przy rozwiązywaniu wielu układów równań różniących się jedynie wektorem wyrazów wolnych.
- W metodach iteracyjnych oprócz zapewnienia, by diagonalna macierzy współczynników nie miała zerowych elementów, konieczne jest jeszcze zapewnienie warunku zbieżności. Może być to operacja kosztowna obliczeniowo (zwłaszcza dla dużych macierzy), gdyż wiąże się z wyliczaniem wartości własnych.
- Metody eliminacji Gaussa z wyborem elementu głównego można zaimplementować w sposób, który nie zmienia fizycznie kolumn i wierszy w przetwarzanej macierzy, niemniej implementacje te wykraczają poza zakres tego sprawozdania.

Bibliografia

1. Z. Fortuna, B. Macukow, J. Wąsowski, „Metody Numeryczne”, wydanie III, wyd. WNT, Warszawa 1982, 1993
2. Åke Björck, Germund Dahlquist, „Metody Numeryczne”, wydanie II, wyd. PWN, Warszawa 1987