Politechnika Wrocławska

Metody numeryczne w fizyce

W11OPA-SM0060G

rok akademicki 2023/24

semestr letni

Wykład 3

Karol Tarnowski

karol.tarnowski@pwr.edu.pl

L-1 p. 220

Politechnika Wrocławska

Plan wykładu

- Układy równań liniowych
- Układy równań do łatwe rozwiązania
- Wyznaczanie rozkładów *LU*
- Eliminacja Gaussa

Na podstawie:

- D. Kincaid, W. Cheney, *Analiza numeryczna*

Układ równań liniowych

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= b_2 \\
\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots \\
a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nn}x_n &= b_n
\end{aligned}
$$

$$
\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}
\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdots \\ x_n \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdots \\ b_n \end{bmatrix}
$$

$$Ax = b$$

Politechnika Wrocławska

Mnożenie macierzy

- macierz A (rozmiaru $n \times p$)
- macierz B (rozmiaru $p \times m$)
- wynik mnożenia AB (macierz rozmiaru $n \times m$)

$$(AB)_{ij} = \sum_{k=1}^{p} a_{ik} b_{kj} \qquad (1 \le i \le m, 1 \le j \le n)$$

Politechnika Wrocławska

Równoważność układów równań

Niech będą dwa układy n równań z n niewiadomymi:

$$Ax = b, \; Bx = d.$$

Takie układy równań są równoważne, jeśli mają identyczne rozwiązania.

Chcąc rozwiązać układ równań możemy przekształcić go do równoważnego prostszego układu.

Politechnika Wrocławska

Operacje elementarne

1. Przestawianie równań ($E_i \leftrightarrow E_j$)

2. Mnożenie równania stronami przez pewną liczbę różną od zera ($\lambda E_i \leftrightarrow E_i$)

3. Dodawanie stronami do równania wielokrotności innego równania ($E_i + \lambda E_j \leftrightarrow E_i$)

Operacje elementarne

Przestawianie równań

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_3 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

Operacje elementarne

Mnożenie równania przez skalar

$$\lambda \neq 0$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \lambda a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \lambda b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

Operacje elementarne

Dodawanie równania z mnożnikiem

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ \lambda a_{21} + a_{31} & \lambda a_{22} + a_{32} & \lambda a_{23} + a_{33} \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & \lambda & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \lambda b_2 + b_3 \end{bmatrix}$$

Odwrotność macierzy

$$Ax = b$$

$$A^{-1}Ax = A^{-1}b$$

$$x = A^{-1}b$$

Układy łatwe do rozwiązania

Załóżmy, że macierz jest przekątniowa

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \qquad x = \begin{bmatrix} b_1/a_{11} \\ b_2/a_{22} \\ \vdots \\ b_n/a_{nn} \end{bmatrix}$$

Jeśli dla pewnego i jest $a_{ii} = 0$ oraz $b_i = 0$, to x_i może być dowolne, natomiast jeśli $a_{ii} = 0$ oraz $b_i \neq 0$ to układ jest sprzeczny.

Politechnika Wrocławska

Układy łatwe do rozwiązania

Załóżmy, że macierz jest trójkątna dolna. Ponadto załóżmy, że $a_{ii} \neq 0$ dla wszystkich i.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

podstawianie w przód

$$x_1 \leftarrow b_1/a_{11}$$

$$x_2 \leftarrow (b_2 - a_{21}x_1)/a_{22}$$

$$x_3 \leftarrow (b_3 - a_{32}x_2 - a_{31}x_1)/a_{33}$$

$$x_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j\right)\Big/a_{ii}$$

Układy łatwe do rozwiązania

Załóżmy, że macierz jest trójkątna górna oraz $a_{ii} \neq 0$ dla wszystkich i.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}$$

podstawianie wstecz

$$x_n \leftarrow b_n / a_{n,n}$$

$$x_{n-1} \leftarrow \left(b_{n-1} - a_{n-1,n} x_{n,n}\right) / a_{n-1,n-1}$$

$$x_i \leftarrow \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j\right) \Big/ a_{ii}$$

Układy łatwe do rozwiązania

W podobny sposób można rozwiązywać układy równań, których macierz powstaje z macierzy trójkątnej przez przestawienie wierszy.

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} a_{31} & 0 & 0 \\ a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_3 \\ b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

permutacja (3,1,2)

Rozkład LU

Załóżmy, że macierz A można wyrazić jako iloczyn macierzy trójkątnej dolnej L i górnej U

$A = LU$.

Wtedy rozwiązywanie układu równań $Ax = b$

można wykonać w dwóch etapach, bo $L(Ux) = b$.

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

Nie każda macierz ma rozkład LU.

Rozkład LU

$$A = LU$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n} \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & u_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Jeżeli rozkład *LU* istnieje, to nie jest określony jednoznacznie.

Politechnika Wrocławska

Rozkład LU - algorytm

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & \cdots & l_{n,n-1} & l_{nn} \end{bmatrix} \qquad U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & u_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & 0 & u_{nn} \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n} \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} \end{bmatrix}$$

$$a_{ij} = \sum_{s=1}^{n} l_{is} u_{sj} = \sum_{s=1}^{\min(i,j)} l_{is} u_{sj}$$

$$l_{is} = 0 \qquad s > i$$

$$u_{sj} = 0 \qquad s > j$$

Politechnika Wrocławska

Rozkład LU - algorytm

Załóżmy, że znamy k-1 wierszy macierzy U oraz k-1 kolumn macierzy L.

$$a_{ij} = \sum_{s=1}^{\min(i,j)} l_{is} u_{sj}$$

Dla $i=j=k$ mamy

$$a_{kk} = \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks} u_{sk} + \boxed{l_{kk}}\,\boxed{u_{kk}},$$

po ustaleniu jednego z elementów l_{kk} lub u_{kk} obliczamy drugi.

Rozkład LU - algorytm

Znając l_{kk} oraz u_{kk} obliczamy pozostałe elementy k-tego wiersza macierzy U oraz k-tej kolumny macierzy L.

$$a_{kj} = \sum_{s=1}^{k} l_{ks} u_{sj} = \sum_{s=1}^{k-1} l_{ks} u_{sj} + l_{kk} \boxed{u_{kj}} \qquad (k < j \leq n+1)$$

$$a_{ik} = \sum_{s=1}^{k} l_{is} u_{sk} = \sum_{s=1}^{k-1} l_{is} u_{sk} + \boxed{l_{ik}} u_{kk} \qquad (k < i \leq n+1)$$

$$a_{ij} = \sum_{s=1}^{\min(i,j)} l_{is} u_{sj}$$

Rozkład LU

- rozkład Doolittle'a

  $l_{ii} = 1$ dla $1 \leq i \leq n$

- rozkład Crouta

  $u_{ii} = 1$ dla $1 \leq i \leq n$

- rozkład Cholesky'ego (dla macierzy rzeczywistej, symetrycznej, i dodatniookreślonej)

  $U = L^{\mathrm{T}}$, czyli $A = LL^{\mathrm{T}}$

Politechnika Wrocławska

Eliminacja Gaussa

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 12 & -8 & 6 & 10 \\ 3 & -13 & 9 & 3 \\ -6 & 4 & 1 & -18 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 34 \\ 27 \\ -38 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & -12 & 8 & 1 \\ 0 & 2 & 3 & -14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ 21 \\ -26 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ \boxed{2} & -4 & 2 & 2 \\ \boxed{1/2} & -12 & 8 & 1 \\ \boxed{-1} & 2 & 3 & -14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ 21 \\ -26 \end{bmatrix}$$

Eliminacja Gaussa

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ \boxed{2} & -4 & 2 & 2 \\ \boxed{1/2} & -12 & 8 & 1 \\ \boxed{-1} & 2 & 3 & -14 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ 21 \\ -26 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ \boxed{2} & -4 & 2 & 2 \\ \boxed{1/2} & \boxed{3} & 2 & -5 \\ \boxed{-1} & \boxed{-1/2} & 4 & -13 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ -9 \\ -21 \end{bmatrix}$$

Eliminacja Gaussa

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ \boxed{2} & -4 & 2 & 2 \\ \boxed{1/2} & \boxed{3} & 2 & -5 \\ \boxed{-1} & \boxed{-1/2} & 4 & -13 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ -9 \\ -21 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ \boxed{2} & -4 & 2 & 2 \\ \boxed{1/2} & \boxed{3} & 2 & -5 \\ \boxed{-1} & \boxed{-1/2} & \boxed{2} & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ -9 \\ -3 \end{bmatrix}$$

Politechnika Wrocławska

Eliminacja Gaussa

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ \boxed{2} & -4 & 2 & 2 \\ \boxed{1/2} & \boxed{3} & 2 & -5 \\ \boxed{-1} & \boxed{-1/2} & \boxed{2} & -3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 12 \\ 10 \\ -9 \\ -3 \end{bmatrix} \qquad x = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 12 & -8 & 6 & 10 \\ 3 & -13 & 9 & 3 \\ -6 & 4 & 1 & -18 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 1/2 & 3 & 1 & 0 \\ -1 & -1/2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 6 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & -4 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{bmatrix}$$

Politechnika Wrocławska

Eliminacja Gaussa

Znaczenie elementów głównych

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 0 & 1-\varepsilon^{-1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2-\varepsilon^{-1} \end{bmatrix}$$

$$x_2 = \left(2-\varepsilon^{-1}\right)/\left(1-\varepsilon^{-1}\right), \quad x_1 = \left(1-x_2\right)\varepsilon^{-1}$$

$$x_2 = 1, \quad x_1 = 0$$

Eliminacja Gaussa

Znaczenie elementów głównych

$$\begin{bmatrix} \varepsilon & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \varepsilon & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1-\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1-2\varepsilon \end{bmatrix}$$

$$x_2 = 1, \quad x_1 = 1$$

Politechnika Wrocławska

Eliminacja Gaussa

Wybór elementów głównych

$$Ax = b \qquad PAx = Pb$$

$$PA = LU$$

$$Lz = Pb \qquad Ux = z$$

- P - macierz permutacji (P powstaje z I poprzez przestawianie wierszy)

$$\left(P\right)_{ij} = \delta_{p_i j}$$

Podsumowanie

- Układy równań liniowych
- Układy równań do łatwe rozwiązania
- Wyznaczanie rozkładów *LU*
- Eliminacja Gaussa