Лабораторная работа №3 (4 часа)

Численное решение систем линейных алгебраических уравнений

Цель работы: получение практических навыков построения алгоритмов решения систем линейных алгебраических уравнений, программной реализации их на компьютере, сравнение различных методов.

Краткие теоретические сведения

Система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) в самом общем случае имеет вид

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

где a_{ij} — заданные коэффициенты системы, b_j — известные свободные члены системы, x_j — неизвестные, подлежащие определению.

Вводя матрицу коэффициентов системы

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

вектор-столбец свободных членов $\mathbf{B} = \left[b_1, b_2, ..., b_n\right]^T$ и вектор-столбец неизвестных $\mathbf{X} = \left[x_1, x_2, ..., x_n\right]^T$, систему (1) можно представить в матричной форме

$$\mathbf{AX=B} \qquad (2)$$

Наиболее эффективные прямые методы решения СЛАУ используют разложения матрицы **A**.

В методе LU-разложения матрица коэффициентов A представляется в виде произведения матриц **L** и **U**.

$$\mathbf{A=LU} \qquad (3)$$

где $\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}$ — нижнетреугольная матрица,

$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}$ — верхнетреугольная матрица, все диагональные элементы которой равны 1.

Вектор **B** в ходе разложения не изменяется.

Метод LU-разложения состоит из двух этапов:

1) факторизация (разложение) матрицы **A**;
2) получение решения **X**.

Факторизация матрицы **A** выполняется за n стадий. На каждой j-той стадии последовательно пересчитываются элементы l_{ij} очередного j-го столбца матрицы **L** по формулам

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \qquad i = \overline{j,n} \tag{4}$$

и элементы u_{ji} очередной j-й строки матрицы **U** по формулам

$$u_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk} u_{ki}}{l_{jj}} \qquad i = \overline{j+1,n} \tag{5}$$

Получение решения **X** системы (2) производится следующим образом: сначала решается система с нижнетреугольной матрицей **L** вида

LY=**B**

с помощью алгоритма прямого хода:

$$y_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} y_j}{l_{ii}}, \qquad i = \overline{1,n} \tag{6}$$

Затем решается система **UX**=**Y** с верхнетреугольной матрицей **U** по формуле обратного хода

$$x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_j, \qquad i = \overline{n,1} \tag{7}$$

Описанная схема LU-разложения может быть реализована только в случаях, когда ее элементы $l_{jj} \neq 0$. Кроме того, близость этих элементов к нулю может привести к большой потере точности вычисленного на машине решения. Чтобы избежать этого, решение системы линейных алгебраических уравнений методом LU-разложения нужно осуществить с выбором наибольшего по модулю (главного) элемента l_{jj}. При этом помимо матриц **L** и **U** необходимо хранить матрицу перестановок **P**. Матрица перестановок получается из единичной матрицы **E** перестановкой строк или столбцов. Факторизованная матрица **A** в этом случае имеет вид:

A=**PLU**

Обычно **P** хранится в виде вектора $\mathbf{P} = \left[p_1, \quad p_2, \quad \ldots, \quad p_n\right]^T$, получающегося в результате перестановки элементов в $\left[1, \quad 2, \quad \cdots, \quad n\right]^T$, причем i-я строка в **P** совпадает с p_i строкой в **E**. Легко видеть, что система **PX**=**B** имеет решение $x_{pi}=b_i$, $i = \overline{1,n}$.

При выборе главного элемента по столбцу на каждом шаге k выполняются следующие операции. Вычисляются элементы l_{ik} по (4) и размещаются на местах a_{ik}, $i = \overline{k,n}$. Если $\max\limits_{i \geq k} |l_{ik}| = |l_{mk}|$ и $m \neq k$, то строки k и m меняются местами, т.е. у всех элементов индекс строки m заменяют индексом k и наоборот. При этом запоминаются номера переставленных строк (если матрица перестановок **P** хранится как вектор с текущими номерами строк, то в нем также переставляются элементы с индексами k и m). Вычисляются элементы u_{ki} по формулам (5) и размещаются на месте элементов a_{ki}, $i = \overline{k+1,n}$.

В ходе LU-разложения вектор **B** не изменяется, поэтому получение матриц **L** и **U** можно использовать для решения СЛАУ с одинаковой матрицей **A** и разными векторами **B**.

При программной реализации алгоритма LU-разложения массивы для хранения матриц **L, U** и вектора **Y** не создаются. Элементы матриц **L** и **U** размещаются в ходе разложения на месте элементов матрицы **A**, причем элементы $u_{jj}=1,\quad j=\overline{1,n}$ не запоминаются. Таким образом, факторизованная матрица **A** имеет вид

$$\mathbf{A}_{\mathrm{LU}}=\begin{bmatrix} l_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix}.$$

Элементы вектора **Y** размещают непосредственно на местах вектора **X**.

Метод разложения Холесского предназначен для решения СЛАУ (2) с симметричной матрицей **A**. Он основан на разложении матрицы **A** в произведение

$$\mathbf{A}=\mathbf{LDL}^{\mathrm{T}} \qquad (8)$$

где **L** — нижнетреугольная матрица, **D** — диагональная матрица.

Факторизация матрицы **A** выполняется за n стадий. На каждой j-й стадии элементы l_{jj} и d_{jj} вычисляются по формулам

$$l_{jj}=1\quad,\qquad j=\overline{1,n}$$

$$d_{jj}=a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^2 d_{kk}\ ,\qquad j=\overline{1,n} \qquad (9)$$

Затем вычисляются элементы l_{ij} очередного j-го столбца по формулам

$$l_{ij}=\frac{a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}d_{kk}l_{jk}}{d_{jj}},\qquad j=\overline{1,n}\ ,\quad i=\overline{j+1,n}$$

После факторизации матрицы **A** сначала решается СЛАУ

$$\mathbf{LY}=\mathbf{B}$$

с помощью прямой подстановки:

$$y_i=b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}y_j,\quad i=\overline{1,n} \qquad (10)$$

Затем решается СЛАУ

$$\mathbf{DZ}=\mathbf{Y}$$

как

$$z_i=\frac{y_i}{d_{ii}} \qquad (11)$$

Решение **X** находим из системы

$$\mathbf{L}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}=\mathbf{Z}$$

$$x_i=z_i-\sum_{j=i+1}^{n}l_{ji}x_j,\ i=\overline{n,1} \qquad (12)$$

При программной реализации алгоритма разложения Холесского массивы для хранения матриц **L, D** и векторов **Y, Z** не создаются. Элементы матриц **L** и **D** размещаются в ходе разложения на местах элементов матрицы **A**, причем элементы $l_{jj}=1, j=\overline{1,n}$ не запоминаются. Таким образом, факторизованную матрицу хранят в виде

$$\mathbf{A}_{\mathrm{LDL^T}}=\begin{bmatrix} d_{11} & a_{12} & \ldots & a_{1n} \\ l_{21} & d_{22} & \ldots & a_{2n} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ l_{n1} & l_{n2} & \ldots & d_{nn} \end{bmatrix}.$$

Элементы векторов **Y** и **Z** размещают непосредственно на местах вектора **X**.

Если матрица **A** симметрична и положительно определена, то ее факторизуют в виде:

$$\mathbf{A}=\mathbf{LL}^{\mathrm{T}}$$

Для этого на каждой j-й стадии факторизации матрицы **A** вычисляют элементы l_{ij} очередного j-го столбца по формулам:

$$l_{jj}=\sqrt{a_{jj}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{jk}^{2}},\quad j=\overline{1,n}$$

$$l_{ij}=\frac{a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}l_{ik}l_{jk}}{l_{jj}},\ j=\overline{1,n},\quad i=\overline{j+1,n},$$

Как видно из приведенных выражений для факторизации матрицы **A** необходимо извлекать квадратный корень. Поэтому этот метод еще называют методом квадратного корня.

После факторизации матрицы **A** решение задачи (2) сводится к решению двух СЛАУ с треугольными матрицами

$$\mathbf{LY}=\mathbf{B},\ \mathbf{L}^{\mathrm{T}}\mathbf{X}=\mathbf{Y}$$

Решение этих систем находят по рекуррентным формулам

$$y_i=\frac{b_i-\sum_{j=1}^{i-1}l_{ij}y_j}{l_{ii}},\quad i=\overline{1,n}$$

$$x_i=\frac{y_i-\sum_{j=i+1}^{n}l_{ji}x_j}{l_{ii}},i=\overline{n,1}$$

Из вычислительных формул метода следует, что для положительно определенной симметричной матрицы **A** процесс факторизации всегда выполним, и никаких перестановок не требуется.

При программной реализации метода квадратного корня массивы для хранения матрицы **L** и вектора **Y** не создаются. В ходе разложения, элементы матрицы **L** размещают на местах элементов матрицы **A**, и факторизованную матрицу хранят в виде

$$\mathbf{A}_{\mathrm{LL^T}}=\begin{bmatrix} l_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n}\\ l_{21} & l_{22} & \dots & a_{2n}\\ \dots & \dots & \dots & \dots\\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn}\end{bmatrix}.$$

Элементы вектора **Y** размещают непосредственно на местах вектора **X**.

В методе QR-разложения матрицу **A** представляют в виде произведения ортогональной матрицы **Q** и треугольной матрицы **R**

$$\mathbf{A}=\mathbf{QR} \qquad (13)$$

В качестве матрицы **Q** чаще всего используют матрицу отражения и матрицу вращения. В первом случае метод QR-разложения называют методом отражения, во втором - методом вращения.

В методе отражения матрицу **R** получают умножением матрицы **A** слева на n-1 матрицу отражения $\mathbf{Q}_j$:

$$\mathbf{R}=\mathbf{Q}_{n-1}\,\mathbf{Q}_{n-2}\dots\mathbf{Q}_1\,\mathbf{A} \qquad (14)$$

Каждая матрица $\mathbf{Q}_j$ обнуляет элементы j-го столбца матрицы

$$\mathbf{A}_{j-1}=\mathbf{Q}_{j-1}\,\mathbf{Q}_{j-2}\dots\mathbf{Q}_1\,\mathbf{A},$$

лежащие ниже главной диагонали, и оставляет без изменения первые j-1 столбцов. Для этого матрица $\mathbf{Q}_j$ представляется в виде

$$\mathbf{Q}_j = \mathbf{E} - k_j \mathbf{S}_j \mathbf{S}_j^T \tag{15}$$

где

$$\mathbf{S}_j = [0, 0, ..., sign(a_{jj}^{(j-1)})\left(\left|\beta_j\right| + \left|a_{jj}^{(j-1)}\right|\right), a_{j+1j}^{(j-1)}, ..., a_{nj}^{(j-1)}]^T ; \tag{16}$$

$$k_j = \frac{1}{(\beta_j^2 - \beta_j a_{jj}^{(j-1)})}; \tag{17}$$

$$\beta_j = \begin{cases} +\sqrt{\sum\limits_{i=j}^{n}\left(a_{ij}^{(j-1)}\right)^2}, & a_{jj}^{(j-1)} < 0 \\ -\sqrt{\sum\limits_{i=j}^{n}\left(a_{ij}^{(j-1)}\right)^2}, & a_{jj}^{(j-1)} > 0 \end{cases}, \tag{18}$$

$a_{km}^{(l)}$ — элементы матрицы $\mathbf{A}_l$, полученные на l-й стадии.

Матрица **Q** в (13) может быть найдена как транспонированная к матрице произведений элементарных матриц $\mathbf{Q}_j$. Однако на практике матрицу **Q** явно не вычисляют, а производят преобразование системы (2) к виду

$$\mathbf{R}\,\mathbf{X} = \mathbf{B}_{n-1} \tag{19}$$

по схеме

$$\begin{aligned} &\mathbf{A}_1 = \mathbf{Q}_1\,\mathbf{A}, && \mathbf{B}_1 = \mathbf{Q}_1\,\mathbf{B} \\ &\mathbf{A}_2 = \mathbf{Q}_2\,\mathbf{A}_1, && \mathbf{B}_2 = \mathbf{Q}_2\,\mathbf{B}_1 \\ &\quad \cdots\cdots && \\ &\mathbf{R} = \mathbf{Q}_{n-1}\,\mathbf{A}_{n-2}, && \mathbf{B}_{n-1} = \mathbf{Q}_{n-1}\,\mathbf{B}_{n-2} \end{aligned} \tag{20}$$

Система (19) решается обратной подстановкой по формулам

$$x_i = \frac{b_i^{(n-1)} - \sum\limits_{j=i+1}^{n} r_{ij} x_j}{r_{ii}}, \quad i = \overline{n,1} \tag{21}$$

Необходимо отметить, что на практике не следует строить матрицу $\mathbf{Q}_j$, $j = \overline{1, n-1}$ в явном виде, а выгодно оставить ее в форме (15). Тогда, в (20) будем иметь

$$\mathbf{A}_j = \mathbf{A}_{j-1} - k_j\,\mathbf{S}_j\,(\mathbf{S}_j^{\mathrm{T}}\,\mathbf{A}_{j-1}) \tag{22}$$

$$\mathbf{B}_j = \mathbf{B}_{j-1} - k_j\,\mathbf{S}_j\,(\mathbf{S}_j^{\mathrm{T}}\,\mathbf{B}_{j-1}) \tag{23}$$

При программной реализации алгоритма QR-разложения, массив для хранения вектора $\mathbf{S}_j$ не создается, а в качестве последних n-j элементов этого вектора используют непосредственно элементы j-го столбца матрицы $\mathbf{A}_{j\text{-}1}$: $a_{ij}^{(j-1)}, i = \overline{j+1, n}$. Вместо j-го элемента вектора $\mathbf{S}_j$ используют значение $sign(a_{jj}^{(j-1)})\left(\left|\beta_j\right| + \left|a_{jj}^{(j-1)}\right|\right)$. Кроме того, элементы j-го столбца матрицы $\mathbf{A}_j$, расположенные ниже главной диагонали, на практике, не обнуляют, что позволяет, при необходимости, восстановить матрицы $\mathbf{Q}_j$. При этом факторизованная матрица имеет вид:

$$\mathbf{A}_{\mathrm{QR}} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1n} \\ a_{21}^{(2)} & r_{22} & \cdots & r_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(2)} & \cdots & r_{nn} \end{bmatrix}. \tag{24}$$

В случае, когда необходимо решать СЛАУ с одинаковыми матрицами **A** и разными векторами **B**, задачу решают в два этапа. На первом этапе по формулам (22) исходную матрицу **A** факторизуют к форме (24). На втором этапе каждый вектора **B** пересчитывают по формулам (23). При этом учитывают, что на местах нулевых элементов j-го столбца матрицы

R хранятся *n-j* элемента вектора $\mathbf{S}_j$: $(a_{j+1j}^{(j-1)}, a_{j+2j}^{(j-1)}, ..., a_{nj}^{(j-1)})$. Для восстановления *j*-го элемента $sign(a_{jj}^{(j-1)})\left(\left|\beta_j\right| + \left|a_{jj}^{(j-1)}\right|\right)$ вектора $\mathbf{S}_j$ используют (18) с учетом, того, что

$$r_{jj} \equiv \beta_j \qquad (25)$$

Значения k_j восстанавливают по (17). Решения СЛАУ x_i для каждого вектора **B** находят по (21).

Некоторые алгоритмы при факторизации используют перестановку столбцов так, что на *j*-м шаге столбец с наибольшим значением суммы квадратов его элементов, лежащих ниже (*j*-1)-й строки переставляется на место *j*-го столбца. При этом помимо факторизованной матрицы **A** хранят вектор перестановок **P**. При этом при использовании (21) вместо x_i необходимо подставить x_{pi}.

Преимущество QR-разложения состоит в том, что поскольку

$$|| \mathbf{A} || = || \mathbf{QR} || = || \mathbf{R} ||,$$

при формировании **R** оно не приведет к существенному увеличению в целом преобразуемой матрицы **A**. Это делает его численно очень устойчивым.

Рабочее задание

1. Для линейной схемы из расчетно-графической работы по курсу “Теория электронных и электрических цепей” получить СЛАУ относительно узловых напряжений узловым методом.
2. Построить алгоритмы решения полученной СЛАУ методами LU-разложения, LL^T разложения Холесского, QR- разложения.
3. Составить рабочую программу для решения СЛАУ каждым методом. Каждый метод должен быть оформлен в виде отдельной универсальной функции. Формальные параметры функции должны включать: **A** - матрицу коэффициентов, **B** - вектор свободных членов, *n*-число уравнений СЛАУ, **X** - вектор решений (возвращаемый параметр).
4. Набрать и отладить программу на компьютере. При отладке следует использовать СЛАУ, для которой предварительно аналитически получены факторизованные формы матрицы **A** и вектор решений.
5. Для СЛАУ, полученной в пункте 1 каждым методом получить и записать факторизованную форму матрицы **A**, вектор решений **X**, и вектор невязки **R**=**AX**-**B**.
6. Сравнить различные методы по надежности, требуемым машинным ресурсам (объем оперативной памяти, количеству арифметических операций, времени выполнения).

Содержание отчета

1. Название работы
2. Цель
3. Рабочее задание
4. Математические формулировки алгоритмов решения СЛАУ каждым методом.
5. Исходная СЛАУ.
6. Рабочая программа.
7. Результаты расчетов.
8. Выводы.