Лабораторная работа № 1

Прямые методы решения систем линейных алгебраических уравнений

Цель работы

Изучение прямых методов решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ):

а) метода Гаусса и его модификаций;

б) метода QR-разложения.

Содержание работы

Рассмотрим систему линейных алгебраических уравнений вида

$$Ax = b, \tag{1}$$

где A — матрица системы размера $n \times n$, $\det A \neq 0$, b — вектор правой части. Требуется выполнить следующие действия.

1) Написать программу решения СЛАУ методом Гаусса (с полным или частичным выбором главного элемента) и методом QR-разложения. Предусмотреть вывод на экран либо в файл матриц Q и R.

2) Подставить полученное решение в исходную (не преобразованную) систему и вычислить норму вектора невязки $\|b - b_1\|$, где b_1 — вектор правой части, полученный при подстановке решения.

3) Провести расчеты с обычной и повышенной точностью[1] для тестовых задач и двух систем своего варианта.

4) Сравнить результаты, полученные при использовании различных типов данных, и оценить достигнутую точность решения.

[1] См. замечание об используемых типах данных во Введении.

5) Внести возмущение в систему, изменив произвольно элементы вектора правых частей на $\pm 0{,}01$. Найти решение возмущенной системы и сравнить его с ранее полученным. Сделать вывод об устойчивости решения к погрешностям исходных данных. Расчет провести для обеих систем своего варианта.

Методические указания

Общие сведения о прямых методах решения СЛАУ

Прямыми, или *точными*, называют методы решения СЛАУ, которые позволяют получить точное решение за конечное число действий при условии, что все арифметические действия выполняются точно (без погрешностей).

В данной лабораторной работе рассмотрим два прямых метода: метод Гаусса и метод QR-разложения.

Метод Гаусса

В координатной форме систему уравнений (0.1) можно записать следующим образом:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j = b_i, \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \tag{2}$$

Метод Гаусса[2], или *метод последовательного исключения неизвестных*, состоит в том, что неизвестные x_j, $j = 1, \ldots, (n-1)$ последовательно исключаются из системы (0.2); в результате она преобразуется к эквивалентной системе с треугольной матрицей:

$$\begin{cases}
a_{11}^{(0)}x_1 + a_{12}^{(0)}x_2 + a_{13}^{(0)}x_3 + a_{14}^{(0)}x_4 + \ldots + a_{1n}^{(0)}x_n = b_1^{(0)},\\
\qquad a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + a_{24}^{(1)}x_4 + \ldots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)},\\
\qquad\qquad a_{33}^{(2)}x_3 + a_{34}^{(2)}x_4 + \ldots + a_{3n}^{(2)}x_n = b_3^{(2)},\\
\qquad\qquad\qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
\qquad\qquad\qquad a_{ii}^{(i-1)}x_i + \ldots + a_{in}^{(i-1)}x_n = b_i^{(i-1)},\\
\qquad\qquad\qquad\qquad \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\
\qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n-1)}x_n = b_n^{(n-1)}.
\end{cases} \tag{3}$$

[2] Карл Фридрих Гаусс (1777–1855) — выдающийся немецкий математик, астроном и физик, один из величайших математиков в истории.

Коэффициенты $a_{ij}^{(k)}$ и компоненты правой части $b_i^{(k)}$ системы (0.3) вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} a_{ij}^{(k)} &= a_{ij}^{(k-1)} - c_{ik} a_{kj}^{(k-1)}, \\ b_i^{(k)} &= b_i^{(k-1)} - c_{ik} b_k^{(k-1)}, \end{aligned} \tag{4}$$

где

$$c_{ik} = a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)},$$

$$i = (k+1),\ \ldots,\ n, \qquad j = k,\ \ldots,\ n, \qquad k = 1,\ \ldots,\ (n-1),$$

причем

$$a_{ij}^{(0)} = a_{ij}, \qquad b_i^{(0)} = b_i.$$

Вычисления по формулам (0.4) называются прямым ходом метода Гаусса. Затем неизвестные x_i последовательно, начиная с x_n, определяются из системы (0.3) по формулам

$$x_i = \left(b_i^{(i-1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}^{(i-1)} x_j \right) \Big/ a_{ii}^{(i-1)}, \qquad i = n, \ldots, 1. \tag{5}$$

Вычисления по этим формулам называются обратным ходом метода Гаусса.

Для реализации прямого хода метода Гаусса требуется порядка $O(n^3/3)$ операций умножения и деления чисел с плавающей точкой, для обратного — порядка $O(n^2/2)$ операций.

Выбор главного элемента

Метод Гаусса применим тогда и только тогда, когда все угловые миноры матрицы A ненулевые, что равносильно требованию $a_{ii}^{(i-1)} \neq 0$ для всех значений $i = 1, \ldots, n$. Но из условия невырожденности $\det A \neq 0$ не следует, что в ходе приведения матрицы A к треугольному виду (0.3) на диагонали не возникнет элементов, равных нулю или малых по абсолютной величине (что также плохо, поскольку это приводит к дополнительным ошибкам округления в вычислениях). В таких случаях метод Гаусса неприменим, поэтому на практике обычно используется вариант алгоритма Гаусса с частичным либо полным выбором главного элемента. Основная идея метода состоит в том, чтобы на очередном шаге исключать не следующее по номеру неизвестное, а то неизвестное, коэффициент при котором является наибольшим по модулю. Этот коэффициент называется ведущим (главным) элементом. Выбор ненулевого коэффициента достаточен для исключения неизвестного, а выбор наибольшего элемента диктуется соображениями устойчивости вычислений.

При частичном выборе поиск главного элемента ведется только по столбцу (или только по строке). При исключении k-й переменной сначала осуществляется поиск наибольшего по модулю коэффициента в k-м столбце среди элементов $a_{ik}^{(k-1)}$, $i = k, \ldots, n$, лежащих не выше главной диагонали. Пусть искомый элемент находится в строке i^*, тогда k-я и i^*-я строки меняются местами и далее производится исключение переменной по стандартной процедуре. При переходе к следующему шагу процедура поиска главного элемента осуществляется снова.

Вариант с полным выбором главного элемента отличается тем, что на k-м шаге исключения переменной поиск главного элемента осуществляется среди элементов $a_{ij}^{(k-1)}$, $i, j = k, \ldots, n$. Затем происходит перестановка столбцов и/или строк матрицы так, чтобы главный элемент матрицы оказался в позиции (k, k). При этом требуется тем или иным способом учитывать изменение нумерации неизвестных x_j, $j = k, \ldots, n$.

Метод QR-разложения

В основе многих методов решения СЛАУ лежит факторизация матрицы исходной системы уравнений, то есть ее представление в виде произведения матриц, удобных для обращения. Таковыми являются ортогональные, треугольные, диагональные и некоторые другие типы матриц. Заметим, что метод Гаусса эквивалентен LU-разложению матрицы системы, где L — нижнетреугольная, а U — верхнетреугольная матрица.

Рассмотрим метод QR-разложения, основанный на представлении матрицы системы в виде произведения ортогональной матрицы Q и верхней треугольной матрицы R. Один из способов получения такого разложения — метод вращений.

На первом этапе этого метода неизвестное x_1 исключается из всех уравнений, кроме первого. Это производится с помощью следующего алгоритма. Для исключения

x_1 из второго уравнения вычисляются коэффициенты

$$c_{12} = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}, \qquad s_{12} = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}},$$

затем первое уравнение системы заменяется линейной комбинацией первого и второго уравнений с коэффициентами c_{12} и s_{12}, а второе уравнение — линейной комбинацией тех же уравнений, но уже с коэффициентами $(-s_{12})$ и c_{12}. Так как $-s_{12}a_{11}+c_{12}a_{21} = 0$, коэффициент во втором уравнении при x_1 обратится в нуль. В итоге исходная система будет приведена к виду:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad\quad a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)}, \\ a_{31}^{(1)}x_1 + a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{3n}^{(1)}x_n = b_3^{(1)}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{n1}^{(1)}x_1 + a_{n2}^{(1)}x_2 + a_{n3}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)}. \end{cases}$$

Это преобразование эквивалентно умножению матрицы системы уравнений (0.1) и вектора правой части слева на ортогональную матрицу T_{12}, имеющую вид

$$T_{12} = \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ -s_{12} & c_{12} & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{pmatrix}.$$

Так как коэффициенты c_{12} и s_{12} подобраны таким образом, что $c_{12}^2 + s_{12}^2 = 1$, то можно считать, что

$$c_{12} = \cos\phi \quad \text{и} \quad s_{12} = \sin\phi.$$

Следовательно, матрица T_{12} — это матрица поворота на угол ϕ по часовой стрелке в плоскости (x_1, x_2), откуда и появилось название метода.

Чтобы исключить x_1 из третьего уравнения, используются коэффициенты

$$c_{13} = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(1)}\right)^2 + \left(a_{31}^{(1)}\right)^2}}, \qquad s_{13} = \frac{a_{31}^{(1)}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(1)}\right)^2 + \left(a_{31}^{(1)}\right)^2}}.$$

Далее первое и третье уравнения заменяются своими линейными комбинациями. Эта операция равносильна умножению слева матрицы $A^{(1)} = T_{12}A$ и вектора правой части $b^{(1)} = T_{12}b$ на ортогональную матрицу T_{13}, имеющую вид

$$T_{13} = \begin{pmatrix} c_{13} & 0 & s_{13} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -s_{13} & 0 & c_{13} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

Аналогичным образом неизвестная x_1 исключается из остальных уравнений, затем переменная x_2 — из всех уравнений, кроме первого и второго, при этом используются матрицы T_{23}, T_{24}, $\dots$, T_{2n} и так далее. Процесс продолжается, пока система не будет приведена к верхней треугольной форме.

В матричном виде все эти операции можно записать так:

$$T = T_{n-1,\,n} \cdot \ldots \cdot T_{24} \cdot T_{23} \cdot T_{1n} \cdot \ldots \cdot T_{13} \cdot T_{12},$$

$$R = TA, \qquad b^* = Tb,$$

где T_{ij} — матрицы поворота, T — матрица результирующего вращения (она также будет ортогональной как произведение ортогональных матриц), R — получающаяся в итоге верхняя треугольная матрица. В результате получается QR-разложение матрицы A, где $Q = T^{-1} = T$.

Если известно QR-разложение матрицы A, то решение системы (1.1) сводится к решению более простых систем уравнений:

1) решение системы $Qb^* = b$;

2) решение системы $Rx = b^*$.

Следует отметить, что метод вращений требует выполнения значительно большего числа операций, чем метод Гаусса.

Содержание отчета

1) Номер варианта и исходные данные.

2) Краткое описание используемых алгоритмов.

3) Результаты расчетов (численное решение, невязки и т.п.).

4) Анализ результатов (сравнение решений, полученных с различной точностью, оценка полученной точности и т.п.).

Контрольные вопросы

1) Каковы условия применимости метода Гаусса?

2) В методе Гаусса с полным выбором ведущего элемента приходится не только переставлять уравнения, но и менять нумерацию неизвестных. Предложите алгоритм, позволяющий восстановить первоначальный порядок неизвестных.

3) Докажите, что если $\det A \neq 0$, то при выборе главного элемента в столбце среди элементов, лежащих не выше главной диагонали, всегда найдется хотя бы один элемент, отличный от нуля.

4) Оцените количество арифметических операций, требуемых для QR-разложения произвольной матрицы A размера $n \times n$.

5*. В каких случаях целесообразно использовать метод Гаусса, а в каких — методы, основанные на факторизации матрицы?

6*. Как можно объединить в одну процедуру прямой и обратный ход метода Гаусса? В чем достоинства и недостатки такого подхода?

Примеры заданий

Системы уравнений для тестирования программы

1) Тестовый пример «Тест 1»:

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

Точное решение

$$x = (1,\ 1,\ 1,\ 1).$$

2) Тестовый пример «Тест 2»:

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

Точное решение

$$x = (1,\ 1,\ 1,\ 1).$$

3) Тестовый пример «Тест 3»:

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 4, \\ 2x_1 + 3x_2 + 3x_3 + 3x_4 = 11, \\ 2x_1 + 4x_2 + 4x_3 + 4x_4 = 15, \\ 4x_1 + 5x_2 + 6x_3 + 7x_4 = 22. \end{cases}$$

Матрица системы вырожденная, система несовместна.

4) Тестовый пример «Тест 4»:

$$
\begin{cases}
10x_1 + 6x_2 + 2x_3 = 25, \\
5x_1 + x_2 - 2x_3 + 4x_4 = 14, \\
3x_1 + 5x_2 + x_3 - x_4 = 10, \\
6x_2 - 2x_3 + 2x_4 = 8.
\end{cases}
$$

Точное решение

$$x = (2,\ 1,\ -0.5,\ 0.5).$$

5) Тестовый пример «Тест 5»:

$$
\begin{cases}
28.859\,x_1 - 0.008\,x_2 + 2.406\,x_3 + 19.240\,x_4 = 30.459, \\
14.436\,x_1 - 0.001\,x_2 + 1.203\,x_3 + 9.624\,x_4 = 18.248, \\
120.204\,x_1 - 0.032\,x_2 + 10.024\,x_3 + 80.144\,x_4 = 128.156, \\
-57.714\,x_1 + 0.016\,x_2 - 4.812\,x_3 - 38.478\,x_4 = -60.908.
\end{cases}
$$

Точное решение $x = (1,\ 1000,\ -20,\ 3)$.