

Rozwiązywanie układów równań liniowych

Wstęp

W bardzo wielu dziedzinach życia spotykamy się z wyznaczaniem rozwiązań układów równań. Począwszy od prostych zagadnień optymalizacyjnych aż po cząstkowe równania różniczkowe z wielocyfrowymi ilościami równań, ograniczone tylko możliwościami komputerów. Aby sprostać potrzebie rozwiązywania takich układów stworzono wiele metod, począwszy od metody Cramera sprawdzającej się dla małych układów, poprzez metodę Gaussa, która w mniej lub bardziej uporządkowany sposób często stosujemy rozwiązując zagadnienie na kartce papieru, poprzez rozkład LU będący najefektywniejszym sposobem dokładnego rozwiązywania układów równań, kończąc na szeregu metod iteracyjnych dających i arytmetyce idealnej przybliżone rozwiązania, często jednak wystarczające lub w rzeczywistości dokładniejsze.

Metody dokładne

Metoda Gaussa

Metoda Gaussa jest metodą służącą przekształceniu układu równań do postaci trójkątnej, którą łatwo rozwiązać metodą podstawień wstecznych czy też sprowadzając do macierzy diagonalnej (co w gruncie rzeczy sprowadza się do identycznych obliczeń). Wraz z macierzą przekształcamy wyrazy wolne, co odpowiada dodawaniu i odejmowaniu stronami równań. Podstawowym problemem, który należy rozwiązać w poważnej implementacji jest takie podatkowe przekształcenie macierzy, aby nie napotkać na przekątnej żadnego zera (w trakcie obliczeń dzielimy przez elementy z przekątnej). Następnie w kolejnych iteracjach rugujemy kolejne części kolumn tak, aby osiągnąć zamierzony efekt. Wadą tej metody jest konieczność ponownego przekształcania/zapamiętywania przekształceń, jeśli chcemy wykorzystać macierz trójkątną do obliczania nowego wektora niewiadomych, gdy zmienił się tylko wektor wyrazów wolnych. Metoda ta jest jednak w praktyce zastępowana przez następną metodę:

Metoda rozkładu LU

Metoda ta polega na przekształceniu układu postaci $Ax=b$ do prostego w rozwiązaniu $LUx=b$, gdzie L i U to macierze trójkątne odpowiednio dolna i górna. Taki układ łatwo rozwiązać:

$$LUx=b$$

$$L(Ux)=b$$

$$Ly=b \text{ – stąd obliczamy } y$$

$$Ux=y \text{ – a stąd } x.$$

Jak widać rozwiązanie wymaga rozwiązania 2 układów trójkątnych, jednak co najważniejsze i co decyduje o przewadze tej metody to możliwość łatwego rozwiązywania układów równań z wieloma możliwymi wektorami wyrazów wolnych. Dla danej macierzy A rozkładu LU trzeba dokonać tylko raz, a później z niego korzystając obliczać różne wektory x dla różnych wektorów b . W rozkładzie tym, aby był on jednoznaczny zakładamy, że elementy na diagonalu jednej z macierzy muszą być równe 1. Poza jednoznacznością pozwala nam to na składowanie obu macierzy L i U w n^2 komórkach pamięci. Przy uznaniu, że elementy na przekątnej macierzy L są równe 1, macierz U jest taka sama, jaką byśmy otrzymali w wyniku

rozkładu Gaussa, zaś macierz L jest niejako obrazem tych przekształceń używanym do wyznaczania wektora rozwiązania. Poza tym obie macierze można w trakcie rozkładu zapisywać w miejsce macierzy A , pamiętając tylko, które elementy są już zerami (zamiast 0 zapisujemy macierz L , 1 zaś pomijamy).

Wnioski na temat metod dokładnych

Podsumowując poza niedokładnymi z względu na arytmetykę float i nadmiernie złożonymi metodami jak metoda Cramera, istnieją dwie podobne obliczeniowo metody: Gaussa i LU, obie z modyfikacjami polegającymi na wstępnym poprawianiu macierzy A , przy czym ich złożoność jest podobna a wybór konkretnej zależy od tego ile wektorów wolnych mamy użyć (czy 1 czy też wiele), gdzie metoda Gaussa jest szybsza tylko przy użyciu z jednym wektorem wolnym.

Metody iteracyjne – przybliżone

Wstęp

W metodach iteracyjnych układamy równanie iteracyjne w postaci:

$x = Mx + W$, gdzie M to macierz, przez którą mnożymy wektor poprzedniego przybliżenia, zaś W to wektor dodawany. W celu wybrania takiej macierzy często dokonujemy rozkładu na sumę. Metody te znajdują zastosowanie wszędzie tam gdzie na skutek indywidualnych cech macierzy ilość operacji w trakcie używania metod iteracyjnych będzie niższa niż przy metodach dokładnych (np. macierze rzadkie), oraz do poprawiania błędów zaokrągleń powstałych przy stosowaniu wyżej omówionych metod dokładnych. W trakcie korzystania z metod iteracyjnych spotykamy się z 2 głównymi problemami:

1. Zbieżność metody iteracyjnej

Choć łatwo jest sprawdzić na potrzeby zajęć normę spektralną gwarantującą zbieżność metody, nie jest to możliwe dla układów równań, przy których z wyżej omówionej metody korzystamy. Wyznaczenia wszystkich wartości własnych może być, i z reguły jest dużo bardziej złożone niż użycie metody dokładnej (Gaussa, LU). Z tego powodu stosuje się często mniej szerokie, ale również wystarczające kryteria, takie jak np. mniejsza od 1 dowolna norma macierzy (zastosowanie znajdują tu normy kolumnowa i wierszowa). Często, jeśli metoda miałaby być niezbieżna, układ równań domnamy razą pewną macierz, mającą na celu „poprawienie” jej promienia spektralnego.

2. Wybór pierwszego przybliżenia.

To, jaki wektor przyjmiemy za pierwsze przybliżenie wpływa znacząco na szybkość zbieżności. Z tego powodu używa się często tzw. algorytmów hybrydowych, gdzie metoda iteracyjna służy do poprawiania błędów zaokrągleń powstałych przy obliczeniach metodami dokładnymi.

Metoda Jacobiego

Pierwsza użyta przez nas metoda, mająca dziś już charakter historyczny. W jej implementacji za macierz M przyjmujemy macierz: $-D^{-1}(L+U)$, zaś wektorem W jest $D^{-1}b$. Jak widać na wykresach rozwiązanie zbiega do właściwego bardzo oscylując (nie monotonicznie). Metoda ta korzysta tylko z poprzedniego przybliżenia wektora x , dlatego jest wolniejsza niż następne metody iteracyjne wykorzystujące więcej informacji. Właściwy wynik dla danej tolerancji otrzymaliśmy po 21 iteracjach.

Metoda Gaussa Seidla

W metodzie tej korzystamy z zmodyfikowanych wzorów na macierz M , oraz wektor W . Jednak najważniejszą zaletą tej metody jest możliwość niezależnego operowania na

pojedynczych składowych wektora, dzięki czemu możemy trzymać w pamięci tylko 1 wektor, który będziemy modyfikować, oraz metoda ta wykorzystując lepsze przybliżenia jest szybciej zbieżna. Można wykazać, że dla dowolnych wektorów początkowych metoda GS ma zawsze mniejszy współczynnik odpowiedzialny za zbieżność (promień spektralny). W mojej implementacji wszystko działa tak jak w implementacji Jacobiego, nie licząc ręcznej realizacji mnożenia macierz*wektor, w celu wykorzystania dodatkowych informacji. Ostatecznie odpowiedni wynik uzyskałem po 9 iteracjach, więc efektywnie metoda potrzebowała o połowę mniej obliczeń.

Wnioski na temat metod iteracyjnych

Obie metody pozwalają uzyskać wynik, przy czym zbieżność drugiej jest zdecydowanie lepsza. Obie wystartowały z wektora 0,0,0, co dodatkowo utrudniło uzyskanie właściwego wyniku. W praktyce metody te stosujemy dla macierzy rzadkich, gdzie mała ilość niezerowych elementów pozwala zdecydowanie zmniejszyć ilość wymaganych obliczeń.

Wnioski ogólne

1. Znamy dwie grupy metod – dokładne i przybliżone, gdzie te pierwsze są numeryczną realizacją algorytmów algebraicznych i dla arytmetyki idealnej dawałyby niezaburzone rezultaty, zaś metody iteracyjne już w swoim wyprowadzeniu zawierają błąd (dokładna wartość to dopiero granica w nieskończonej iteracji), są za to odporniejsze na błędy zaokrągleń.
2. Metody iteracyjne dla macierzy pełnych wymagają większej ilości obliczeń, rekompensują to jednak ww. odpornością, oraz możliwości uniknięcia większej części działań dla niektórych szczególnych macierzy.
3. Problemem dla metod iteracyjnych jest sprawdzenie warunku zbieżności, który na potrzeby dydaktyczne można sprawdzić niezawodnym warunkiem związanym z promieniem spektralnym, w praktycznych aplikacjach jest to jednak niemożliwe i wymaga uznania innych, mniej doskonałych metod.
4. W razie potrzeby użycia różnych wektorów b najlepiej zastosować rozkład LU, gdyż bardzo zmniejsza on ilość obliczeń dla 2 i następnych rozwiązań.
5. Nie licząc aplikacji pisanych samodzielnie, np. na mikroprocesory, najlepiej korzystać z gotowych pakietów do obliczeń numerycznych, implementujących bardziej zaawansowane metody iteracyjne niż te poznane przez nas.