

Rozwiązywanie URL metodami bezpośrednimi (2)

Nadal zajmujemy się rozwiązywaniem układów algebraicznych równań liniowych $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ metodami numerycznymi.

Tym razem posłużymy się metodą *rozkładu LU*, w której macierz \mathbf{A} zastępuje się iloczynem macierzy \mathbf{LU} , gdzie \mathbf{L} jest macierzą trójkątną dolną z jedynkami na diagonalu, a \mathbf{U} — macierzą trójkątną górną. Wyznaczenia rozwiązania \mathbf{x} tą metodą sprowadza się do rozwiązania dwu układów z macierzami trójkątnymi: $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ i $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$.

W bibliotece *Numerical Recipes* rozkładu LU macierzy dokonuje procedura LUDCMP, zaś postępowanie odwrotne realizuje procedura LUBKSB:

```
REAL a(np,np), b(np,np), x(np), p
INTEGER i, j, indx(np)
...
DO i=1,np
  x(i)=b(i,1)
ENDDO
...
CALL LUDCMP(a,n,np,indx,p)
CALL LUBKSB(a,n,np,indx,x)
```

Wówczas, podobnie jak w procedurze GAUSSJ wektor wyrazów wolnych \mathbf{b} jest nadpisywany rozwiązaniem \mathbf{x} .

Dekompozycja LU może też posłużyć do szybkiego odwracania macierzy, tj. znajdowania macierzy $\mathbf{Y} = \mathbf{A}^{-1}$, takiej, że $\mathbf{AA}^{-1} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{A} = \mathbf{1}$:

```
INTEGER np, indx(np)
REAL a(np,np), y(np,np)

DO i=1,n
  DO j=1,n
    y(i,j)=0.
  ENDDO
  y(i,i)=1.
ENDDO

CALL LUDCMP(a,n,np,indx,p)

DO j=1,n
  CALL LUBKSB(a,n,np,indx,y(1,j))
ENDDO
```

Po tej operacji elementy macierzy y będą zawierały elementy macierzy odwrotnej do macierzy a .

Zawarte w bibliotece *GNU Scientific Library (GSL)* funkcje służące do rozwiązywania układów równań liniowych operują na obiektach `gsl_vector` i `gsl_matrix` (lub `gsl_vector_complex` i `gsl_matrix_complex` w przypadku obliczeń w zbiorze liczb zespolonych – należy wtedy użyć zespolonych odpowiedników opisanych poniżej funkcji, szczegóły w dokumentacji biblioteki).

Rozdział dokumentacji *GSL* pt. *Vectors and Matrices* opisuje sposoby tworzenia takich obiektów i przeprowadzania na nich wielu godnych uwagi operacji.

Rozkład LU macierzy \mathbf{A} realizowany jest za pomocą funkcji

```
int gsl_linalg_LU_decomp (gsl_matrix * A, gsl_permutation * p, int * signum),
```

której użycie skutkuje zapisaniem macierzy \mathbf{U} nad i na diagonalu macierzy \mathbf{A} ; poniżej diagonalu umieszczana jest macierz \mathbf{L} (oczywiście jej przekątnej, zawierającej same jedynki, nie trzeba nigdzie zapisywać).

Permutację p tworzy się funkcją `gsl_permutation * gsl_permutation_alloc (size_t n)`; p wraz z `signum` zawierają zakodowaną macierz permutacji dla wykonanej dekompozycji.

Natomiast funkcja

```
int gsl_linalg_LU_solve (const gsl_matrix * LU, const gsl_permutation * p,  
                        const gsl_vector * b, gsl_vector * x)
```

rozwiązuje układ $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ wykorzystując rozkład LU macierzy \mathbf{A} na $(\mathbf{LU}, \mathbf{p})$, wyznaczone wcześniej za pomocą `gsl_linalg_LU_decomp`. Wynik umieszczany jest w \mathbf{x} .

Krzysztof Malarz & Maciej Wołoszyn, Kraków, 21 października 2004