Лекция 4. Численное решение систем линейных уравнений (СЛАУ). Векторно-матричная форма записи СЛАУ. Существование и единственность решения СЛАУ. Обусловленность СЛАУ. Конечные методы решения СЛАУ. Метод Гаусса. Прямой и обратный ход. Выбор главного элемента. Метод полного исключения Жордана. Вычисление определителя и обратной матрицы.

Алгоритмы построения решения многих задач приводят нас к вычислительным задачам линейной алгебры. Так происходит при построении интерполяционного кубического сплайна, при численном решении дифференциальных и интегральных уравнений, при построении элемента наилучшего приближения в гильбертовом пространстве и в ряде других случаев. Поэтому очень важно уметь хорошо решать вычислительные задачи линейной алгебры.

К вычислительным задачам линейной алгебры относят задачи решения

r r

систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) $A x = b$, вычисления обратных матриц A^{-1} , вычисления определителей A , задачи вычисления собственных чисел и собственных векторов матриц. Эти задачи имеют очень важное теоретическое и прикладное значение. Трудности решения указанных задач, как правило, связаны с большой размерностью матриц.

Чаще всего вычислительные задачи линейной алгебры решают точными и итерационными методами.

Определение 1. Метод называется точным, если в предположении отсутствия ошибок округлений, получается точное решение за конечное число шагов.

Определение 2. Метод называется итерационным, если решение получается в виде предела элементов некоторой последовательности.

В точных методах матрицу исходной системы уравнений эквивалентными преобразованиями приводят к более простой матрице или раскладывают на произведение более простых матриц.

Большинство точных методов относятся к так называемым методам исключения. В этих методах, последовательно исключая неизвестные, исходную систему приводят к системе с треугольной или диагональной матрицей. Очевидно, что последние легко разрешимы.

4.1. Метод исключения Гаусса (схема единственного деления) решения систем линейных алгебраических уравнений

Пусть дана система линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

106r r

$A x = b$,

(4.1)

r

r

где A – вещественная матрица порядка n , b - заданный вектор, x – искомый вектор.

Предположим, что $| A | \neq 0$. Тогда система (4.1) имеет единственное решение. Перепишем систему (4.1) в скалярном виде

⎧ a 11 x 1 + a 12 x 2 + ... + a 1 n x n = b 1 ,

⎪ a x + a x + ... + a x = b ,

⎪ 21 1

22 2

2 n n

2

⎨

| ....
| ⎩ $a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + ... + a_{nn} x_n = b_n$.
(4.2)
Систему (4.2) будем решать методом исключения Гаусса, который называют также методом последовательного исключения неизвестных. Он известен в различных вариантах уже более 2000 лет. Метод состоит в последовательном исключении неизвестных x_1 , x_2 ,..., x_n из уравнений системы.
Пусть $a_{11} \neq 0$. Разделив первое уравнение на a_{11} , имеем
$x_1 + c_{12} x_2 + ... + c_{1n} x_n = y_1$,
a 1 j
(4.3)
b 1
.
a 11
a 11
Теперь умножаем уравнение (4.3) последовательно на a_{i1} , $i = 2 , 3 ,..., n$ и вычитаем, соответственно, из 2-го, 3-го, ..., n -го уравнений. В результате получаем
где c 1 j =
, j = 2 , 3 ,..., n , y 1 =
⎧ x 1
|
| |
⎨
|
|
| ⎩
+
c 12 x 2
a 22 (1) x 2
a 32 (1) x 2
+ c 13 x 3
+ a 23 (1)
+ a 33 (1)
...
...
a x 2 +
(1)
n 2
...
a n (1 3)
+ ... + c 1 n x n
+ ... + a 2 (1 n) x n
+ ... + a 3 (1 n) x n
= y 1 ,
= b 2 (1) ,
= b 3 (1) ,
(4.4)
... ...
...
... ...

(1)
+ ... + $a_{nn} x_n = b_n^{(1)}$.
Таким образом, x_1 исключили из всех уравнений начиная со второго.
Далее, первое уравнение системы (4.4) оставляем без изменения. Теперь,
предполагая, что $a_{22}^{(1)} \neq 0$, делим на него второе уравнение в (4.4) и
107аналогично предыдущему исключаем x_2 из всех
третьего, и т. д. В результате приходим к системе
⎧ $x_1 + c_{12} x_2 + c_{13} x_3 + ... + c_{1n} x_n$
⎪
$+ c_{23} x_3 + ... + c_{2n} x_n$
x_2
⎪ ⎪
... ...
...
⎨
⎪
$x_{n-1} + c_{n-1,n} x_n$
⎪
⎪ ⎩
x_n
уравнений, начиная с
=
=
... y_1 ,
y_2 ,
...
=
= y_{n-1} ,
y_n .
(4.5)
Матрица этой системы
⎛
⎜
⎜
C = ⎜
⎜
⎜
⎜
⎝
1
0 c_{12}
1 c_{13}
c_{23} ...
... $c_{1,n-1}$
$c_{2,n-1}$
...
0
0 ...
0
0 ...
0
0 ...

...
... ...
1
0
⎞
⎟
⎟
... .. ⎟
⎟
$c_{n-1,n}$ ⎟
1 ⎟⎠
c_{1n}
c_{2n}
(4.6)

содержит нули всюду ниже главной диагонали. Такие матрицы называются верхними треугольными. Нетрудно проверить, что C^{-1} есть также верхняя треугольная матрица.

Преобразование системы (4.2) к эквивалентной системе (4.5) с верхней треугольной матрицей называется прямым ходом метода Гаусса.

Вычисление неизвестных из (4.5) называется обратным ходом метода Гаусса.

Неизвестные x_i вычисляются так: из последнего уравнения находим x_n, из предпоследнего − x_{n-1} и т.д. Итак

$$x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} x_j, \quad i = n-1,\dots,1; \quad x_n = y_n. \qquad (4.7)$$

Изложенный алгоритм называется схемой единственного деления метода исключения Гаусса.

Недостатки данного метода. Если ведущий элемент $a_{kk}^{(k-1)}$ на каком-либо шаге окажется равным нулю, то эта схема формально непригодна (из-за деления на нуль метод падает), хотя заданная система уравнений может иметь единственное решение. Кроме того, если определитель системы не равен нулю, но в процессе вычислений встречаются ведущие элементы $a_{kk}^{(k-1)}$, которые достаточно малы по сравнению с другими элементами соответствующей строки, то это обстоятельство способствует усилению отрицательного влияния погрешностей округления на точность результата. Вычислительная погрешность может существенно нарастать.

Число действий (трудоемкость метода). Для реализации метода Гаусса (схема единственного деления) требуется примерно $\frac{2}{3} n^3$ арифметических операций, причем подавляющее число этих действий совершается на этапе прямого хода.

Русские математики Клюев и Коковкин-Щербак доказали, что в общем случае система линейных алгебраических уравнений не может быть решена точными методами с помощью меньшего числа операций, чем требуется в Гауссовском исключении.

4.2. Метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу

Если в схеме единственного деления на некотором шаге ведущий элемент $a_{kk}^{(k-1)}$ окажется равным нулю, то схема единственного деления не может быть реализована, несмотря на то, что система $A\vec{x} = \vec{b}$ (4.1) имеет единственное решение. В этом случае может быть применен метод Гаусса с выбором главного элемента.

Главный элемент можно выбирать по строчке, по столбцу (частичный выбор) или по всей матрице A. Изложим наиболее простой и широко применяемый метод исключения Гаусса с выбором главного элемента по столбцу.

Выбираем максимальный по модулю элемент в первом столбце матрицы A. Пусть $|a_{m1}| = \max_{1 \le i \le n} |a_{i1}|$, т.е. максимальный по модулю элемент первого столбца стоит в m-й строке. Меняем местами первое и m-е уравнения системы с соответствующей перенумерацией элементов этих уравнений. Делим новое первое уравнение на коэффициент при x_1, имеем

$$x_1 + c_{12}x_2 + ... + c_{1n}x_n = y_1,$$

$$c_{1j} = \frac{a_{1j}}{a_{11}},\ j = 2, 3, ..., n,\quad y_1 = \frac{b_1}{a_{11}}, \qquad (4.8)$$

и, исключив x_1 из второго, третьего,..., n-го уравнений точно так же, как в пункте 4.1, получаем систему

⎧ x 1
|
| |
⎨
|
|
| ⎩
+
c 12 x 2
+
c 13 x 3
+ ... +
c 1 n x n
a x 2 + a x 3 + ... + a x n
a 32 (1) x 2 + a 33 (1) x 3 + ... + a 3 (1 n) x n
...
...
...
... ...
...
(1)
22
a n (1 2) x 2
(1)
23
+ a n (1 3) x 3
(1)

2 n
+ ... + $a_{nn}^{(1)} x_n$
=
y_1 ,
$= b_2^{(1)}$,
$= b_3^{(1)}$,
... ...
(4.9)
$= b_n^{(1)}$.

Далее первое уравнение системы (4.9) оставляем без изменения.
Выбираем максимальный по модулю элемент во втором столбце матрицы системы (4.9), начиная со второй строки. Пусть $| a_{l2}^{(1)} | = \max_{2 \le i \le n} | a_{i2}^{(1)} |$, т.е. максимальный по модулю элемент второго укороченного столбца стоит в l -той строке. Меняем местами второе и l -тое уравнения системы (4.9). Исключаем x_2 из всех уравнений, начиная с третьего, и т.д. После n шагов получаем систему уравнений с верхней треугольной матрицей.
Обратный ход метода Гаусса (т.е. вычисление неизвестных x_i , $i = 1 ,..., n$) осуществляем так же, как и в схеме единственного деления.
Заметим, что дополнительная работа по выбору главных элементов в схеме частичного выбора требует порядка n^2 действий, что практически не влияет на общую трудоемкость метода.
Известно, что для некоторых классов матриц при использовании схемы единственного деления главные элементы гарантированно располагаются на главной диагонали и поэтому применять частичный выбор нет необходимости. Именно так, например, обстоит дело с системами, имеющими положительно определенные матрицы, а так же матрицы с диагональным преобладанием.
Замечание. Метод Гаусса с частичным выбором главного элемента можно применять к любой СЛАУ с невырожденной матрицей. Однако этот метод не всегда вычислительно устойчив. Например, пусть методом Гаусса с выбором главного элемента по столбцу решается система $A\vec{x} = \vec{b}$ с матрицей коэффициентов

0
⎛ 1 0
⎜
0
⎜ − 1 1
A = ⎜
− 1 − 1 1
⎜ ⎜
⎝ − 1 − 1 − 1
1 ⎞
⎟
1 ⎟
.
1 ⎟
⎟
1 ⎟ ⎠

110Приведение такой матрицы к треугольному виду прямым ходом метода Гаусса равносильно следующей последовательности эквивалентных преобразований матрицы A:

$$A=\begin{pmatrix}1&0&0&1\\-1&1&0&1\\-1&-1&1&1\\-1&-1&-1&1\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}1&0&0&1\\0&1&0&2\\0&-1&1&2\\0&-1&-1&2\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}1&0&0&1\\0&1&0&2\\0&0&1&4\\0&0&-1&4\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{pmatrix}1&0&0&1\\0&1&0&2\\0&0&1&4\\0&0&0&8\end{pmatrix}.$$

В случае матрицы такого типа размерности $n\times n$ прямой ход метода Гаусса допускает рост элементов матрицы до $2^{(n-1)}$. При больших n это может привести если не к переполнению разрядной сетки ЭВМ, то к сильному влиянию погрешностей округлений на конечный результат.

Этот недостаток метода исключения Гаусса побуждает к разработке других точных методов, может быть более сложных, но численно более устойчивых, таких, например, как метод вращений, который будет изложен ниже.

4.4. Компактная схема Гаусса

Как было показано в параграфе 4.1., для того, чтобы решить систему (4.1), нам достаточно знать коэффициенты c_{ij} и правые части y_i системы (4.5). Явно их можно вычислить следующим образом.

Пусть осуществлены первые $(k-1)$ шагов, т.е. уже исключены $x_1,\dots,x_{k-1}$, следовательно, система (4.1) приведена к виду:

$$\begin{cases} x_1 + c_{12}x_2 \\ \\ a_{kk}^{(k-1)} \end{cases}$$

x 2
+ ... + c 1 k x k + ... +
c 1 n x n
=
y 1 ,
+ ...
... +
... c 2 k x k
... + ... +
... ...
c 2 n x n
...
=
...
y 2 ,
...
x k − 1 + c k − 1 , k x k
a kk (k − 1) x k
... + ... + c k − 1 , n x n = y k − 1 ,
+ ... + a kn (k − 1) x n = b k (k − 1) ,
... ...
...
... ...
a nk (k − 1) x k + ... + a nn (k − 1) x n
(4.10)
= b n (k − 1) .
Рассмотрим k -е уравнение системы (4.10) и предположим, что
≠ 0 . Разделив обе части этого уравнения на a kk (k − 1) , получаем
x k + c k , k + 1 x k + 1 + ... + c k , n x n = y k ,
(4.11)
111где
c kj =
a kj (k − 1)
a kk (k − 1)
b k (k − 1)
, j = k + 1 ,..., n , y k = (k − 1) .
a kk
Теперь уравнение (4.11) умножаем последовательно на a ik (k − 1) и
вычитаем, соответственно, из (i -го) уравнения системы (4.10). В результате
последняя группа уравнений системы (4.10) принимает вид
⎧ x k
⎪
⎪
⎨
⎪
⎪ ⎩
+
c k , k + 1 x k + 1
a k (+ k 1) , k + 1 x k + 1 + ... + c k , n x n
+ ... + a k (k + 1) , n x n = y k ,
= b k (+ k 1) ,
...

(k)
$a_{n, k+1} x_{k+1}$ ... ...
+ ... + ...
$= b_n^{(k)}$,
...
(k)
$a_{nn} x_n$
(4.12)
где
$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} c_{kj}, \; i, j = k+1, \dots, n; \; b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}$
$y_k, \; i = k+1, \dots, n.$
Таким образом, в прямом ходе метода Гаусса коэффициенты уравнений
преобразуются по формулам
$a_{kj}^{(0)} = a_{kj}, \; k, j = 1, 2, \dots, n;$
$c_{kj} =$
$a_{kj}^{(k-1)}$
a
$(k - 1)$
kk
$, \; j = k+1, \dots, n, \; k = 1, 2, \dots, n;$
$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} c_{kj}, \; i, j = k+1, \dots, n, \; k = 1, \dots, n.$
(4.13)
(4.14)
Вычисление правых частей системы (4.5) осуществляется по формулам
$b_k^{(k-1)}$
$b = b_k, \; y_k = (k-1), \; k = 1, \dots, n;$
a_{kk}
$b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} y_k, \; i = k+1, \dots, n.$
(0)
k
(4.15)
(4.16)
По формулам (4.13) – (4.16) вычисляем коэффициенты c_{ij} , правые
части y_i , $i = 1, \dots, n$, $j = i+1, \dots, n$, системы (4.5) и затем осуществляем
обратный ход, как и в схеме единственного деления.
Реализация прямого хода метода Гаусса по формулам (4.13)-(4.16)
называется компактной схемой Гаусса.
1122.4. Метод оптимального исключения
Методом оптимального исключения называется следующий алгоритм
решения СЛАУ. Дана система
⎧ $a_{11} x_1 + a_{12} x_2 + \dots + a_{1n} x_n = b_1$,
⎪ $a x + a x + \dots + a x = b$,
⎪ 21 1 22 2
2 n n
2
⎨
⎪ ....
⎪ ⎩ $a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + \dots + a_{nn} x_n = b_n$.
(4.17)
Делим первое уравнение на a_{11} . Получаем $x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + \dots + a_{1n}^{(1)} x_n = a_{1, n+1}^{(1)}$
+ 1 .
Умножаем данное уравнение на a_{21} и вычитаем его из второго

уравнения системы (4.17). Получившееся второе уравнение делим на
коэффициент при
x_2 и исключаем x_2 из преобразованного первого
уравнения. После первого шага система принимает вид:

a 13 (2) x 3 + ...
+
⎧ x 1
⎪
x 2
+ a 23 (2) x 3 + ...
⎪ ⎪
⎨ a 31 x 1 + a 32 x 2 + a 33 x 3 + ...
⎪ ... ...
...
... ...
⎪
⎪ ⎩ a n 1 x 1 + a n 2 x 2 + a n 3 x 3 + ...
+ a 1 (n 2) x n
+ a 2 (2 n) x n = b 1 (2) ,
= b 2 (2) ,
+ a 3 n x n
...
... = b 3 ,
... ...
+ =
a nn x n
b n .

Теперь исключаем x_1 и x_2 из третьего уравнения. Преобразованное третье уравнение делим на коэффициент при x_3 и исключаем x_3 из первых двух уравнений, и т.д. В итоге получаем $x_i = y_i$, $i = 1, 2, \dots, n$, т.е. мы вычислили решение системы (4.17).

Последовательное введение уравнений экономит память ЭВМ. Метод позволяет решать системы, порядок которых в 2 раза больше чем при решении с помощью схемы единственного деления.

4.5. LU- разложение

Доказано, что с алгебраической точки зрения метод исключения Гаусса (схема единственного деления) эквивалентен разложению матрицы A на произведение двух треугольных матриц $A = LU$, где L
– нижняя
треугольная матрица, а U – верхняя. Пусть имеется матрица $A = (a_{i,j})_1^n$. Если
113r r
известно разложение $A = LU$, то решение системы $A\vec{x} = \vec{b}$ сводится к
r r
r r
решению двух систем с треугольными матрицами $L\vec{y} = \vec{b}$ и $U\vec{x} = \vec{y}$.

Решение СЛАУ с треугольными матрицами не вызывает затруднений. Возникает вопрос, когда такое разложение возможно. Ответ на этот вопрос дает теорема.

Теорема об LU-разложении. Пусть все главные миноры матрицы A отличны от нуля ($\Delta_j \neq 0$, $j = 1, \dots, n$), тогда матрицу A можно представить единственным образом в виде произведения $A = LU$, где L – нижняя треугольная матрица с ненулевыми диагональными элементами, U – верхняя

треугольная матрица с единицами по главной диагонали.
Доказательство
Доказательство будем вести по индукции по размерности матрицы.
$n = 1 : A= (a_{11}) \to L = a_{11} , U = (1) , a_{11} \neq 0$.
⎛ a a ⎞
n = 2 : A = ⎜ ⎜ 11 12 ⎟ ⎟ .
⎝ a 21 a 22 ⎠
0 ⎞
⎛ 1 u 12 ⎞
⎛ l
⎟ ⎟ .
Матрицы L и U будем искать в виде L = ⎜ ⎜ 11
⎟ ⎟ , U = ⎜ ⎜
⎝ 0 1 ⎠
⎝ l 21 l 22 ⎠
Так как должно выполняться равенство A = LU , то, перемножая
матрицы, для определения неизвестных l_{ij} и u_{ij} получаем систему уравнений
$l_{11} = a_{11} , l_{11} u_{12} = a_{12}$,
$l_{21} = a_{21} , l_{21} u_{12} + l_{22} = a_{22}$.
Решая эту систему, находим
a
a a − a 21 a 12
.
l 11 = a 11 , u 12 = 12 , l 21 = a 21 , l 22 = 11 22
a 11
a 11
По условию $a_{11} \neq 0$,
$a_{11} a_{22} - a_{21} a_{12} \neq 0$, поэтому система имеет
единственное решение и $l_{11} \neq 0$ и $l_{22} \neq 0$.
Пусть утверждение теоремы справедливо для матриц порядка $(k - 1)$.
Докажем справедливость утверждения для матрицы порядка k . Представим
матрицу A следующим образом:
⎛ a 1 k ⎞
r
⎜
⎜ r
⎛ A k − 1 a k − 1 ⎞
r
⎟ ⎟ , где a k − 1 = ⎜ ... ⎟ , b k − 1 = (a k 1 ... a k , k − 1) .
A = ⎜ ⎜ r
⎝ b k − 1 a kk ⎠
⎜ a ⎟
⎝ k − 1 , k ⎠
114Матрицы
L k
и
U k
будем
искать
в
виде
⎛ L

$$L_k = \begin{pmatrix} L_{k-1} & 0 \\ \vec{l}_{k-1} & l_{kk} \end{pmatrix}, \quad U_k = \begin{pmatrix} U_{k-1} & \vec{u}_{k-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

где $\vec{l}_{k-1} = (l_{k1}, \ldots, l_{k,k-1})$, $\vec{u}_{k-1} = (u_{1k}, u_{2k}, \ldots, u_{k-1,k})^T$ – вектор-строка и вектор-столбец. По предположению индукции $A_{k-1} = L_{k-1} U_{k-1}$. Исходя из матричного равенства

$$A_k = \begin{pmatrix} A_{k-1} & \vec{a}_{k-1} \\ \vec{b}_{k-1} & a_{kk} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{k-1} & 0 \\ \vec{l}_{k-1} & l_{kk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{k-1} & \vec{u}_{k-1} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (4.18)$$

для определения неизвестных $\vec{l}_{k-1}$, l_{kk} и $\vec{u}_{k-1}$ получаем систему уравнений

$$L_{k-1} \vec{u}_{k-1} = \vec{a}_{k-1}, \quad (4.19)$$

$$\vec{l}_{k-1} U_{k-1} = \vec{b}_{k-1}, \quad (4.20)$$

$$\vec{l}_{k-1} \vec{u}_{k-1} + l_{kk} = a_{kk}. \quad (4.21)$$

Так как из равенства $A_{k-1} = L_{k-1} U_{k-1}$ и условия $A_{k-1} \neq 0$ следует, что $L_{k-1} \neq 0$ и $U_{k-1} \neq 0$, то система уравнений (4.19)-(4.21) однозначно разрешима. Отсюда $\vec{u}_{k-1} = L_{k-1}^{-1} \vec{a}_{k-1}$, $\vec{l}_{k-1} = \vec{b}_{k-1} U_{k-1}^{-1}$ и $l_{kk} = a_{kk} - \vec{l}_{k-1} \vec{u}_{k-1}$.

Докажем, что $l_{kk} \neq 0$. Из разложения (4.18) следует, что

$$\det(A_k) = \det(L_{k-1})\, l_{kk} \det(U_{k-1}),$$

отсюда, т.к. $\det(A_k) \neq 0$, $\det(L_{k-1}) \neq 0$, $\det(U_{k-1}) \neq 0$, то и $l_{kk} \neq 0$.

Справедливость разложения $A = LU$ доказана. Осталось доказать единственность разложения. Будем вести доказательство от противного. Пусть $A = L_1 U_1 = L_2 U_2$ (здесь нижний индекс означает номер, а не размерность), отсюда

$$L_1^{-1} L_2 = U_1 U_2^{-1}. \qquad (4.22)$$

Получили слева нижнюю треугольную матрицу, а справа − верхнюю, а это возможно только в том случае, если $L_1^{-1} L_2$ и $U_1 U_2^{-1}$ − диагональные. Но на диагонали матрицы $U_1 U_2^{-1}$ стоят единицы, следовательно, $U_1 U_2^{-1} = L_1^{-1} L_2 = E$ и $U_1 = U_2$, $L_1 = L_2$. Теорема доказана.

Если все главные миноры матрицы A отличны от нуля, то справедливы рекуррентные формулы, позволяющие найти элементы матриц L и U:

115

$$u_{11} = a_{11}, \quad u_{1j} = a_{1j}, \quad l_{j1} = \frac{a_{j1}}{u_{11}}, \quad j = 2, 3, \ldots, n,$$

$$u_{ii} = a_{ii} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} u_{pi}, \quad i = 2, 3, \ldots, n, \qquad (4.23)$$

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} u_{pj}, \quad l_{ji} = \frac{a_{ji} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{jp} u_{pi}}{u_{ii}},$$

$i = 2, 3, \ldots, n$, $j = i+1, i+2, \ldots, n$. Здесь $l_{ii} = 1$.

Замечание. Так как схема единственного деления эквивалентна LU-разложению, то из доказанной теоремы следует, что если все главные миноры матрицы A отличны от нуля, то схема единственного деления работает (нет деления на нуль).

2.6. Метод квадратных корней

Объем вычислений, требующихся для решения систем линейных алгебраических уравнений с симметрическими матрицами, можно сократить почти вдвое, если учитывать симметрию при треугольной факторизации матриц (разложении на произведение двух треугольных матриц).

Пусть $A = (a_{ij})_{i,j=1}^{n}$ – данная симметрическая матрица, т.е. $a_{ij} = a_{ji}$. Представим ее в виде $A = U^T U$, где

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} \\ 0 & u_{22} \\ \ldots & \ldots \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

... u 1 n ⎞
⎛ u 11 0
⎜
⎟
... u 2 n ⎟
⎜ u 12 u 22
T
,
U
=
⎜ ... ...
... ... ⎟
⎜ ⎟
⎜ ⎟
... u nn ⎠
⎝ u 1 n u 2 n
... 0 ⎞
⎟
... 0 ⎟
.
... ... ⎟
⎟
... u nn ⎟ ⎠
n (n + 1)
уравнений относительно такого же
2
количества неизвестных (элементов матрицы U):
Составим систему
u 11 2 = a 11 ,
u 12 u 11
= a 12 ,
...,
u 12 2 + u 22 2 = a 22 , ...,
....
u 11 u 1 n = a 1 n ,
u 12 u 1 n + u 22 u 2 n
.... = a 2 n ,
....
u 1 2 n + u 2 2 n + ... + u nn 2 = a nn .
116Из первой строки уравнений находим сначала u 11 = a 11 , затем
u 1 j =
a 1 j
u 11
при j = 2 ,..., n . Из второй – u 22 = a 22 − u 12 2 , затем u 2 j =
a 2 j − u 12 u 1 j
u 22
n − 1
при j = 3 ,..., n и т.д. Завершается процесс вычислением u nn = a nn − ∑ u kn 2 .
k = 1
Таким образом, матрица U может быть определена совокупностью
формул
i − 1

$$u_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki}^2 \quad \text{при } i = 1, 2, \ldots, n;$$

$$u_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki} u_{kj}}{u_{ii}} \qquad (4.24)$$

при $i = 2, \ldots, n$, $j > i$ ($u_{ij} = 0$ при $j < i$).

Осуществимости вещественного $U^T U$ – разложения вещественной симметрической матрицы A могут помешать два обстоятельства: обращение в нуль элемента u_{ii} при каком-либо $i \in \{1, 2, \ldots, n\}$ и отрицательность подкоренного выражения. Известно, что для важного в приложениях класса симметричных положительно определенных матриц разложение по формулам (4.24) выполнимо.

При наличии $U^T U$ - разложения решение системы с симметрической матрицей $A\vec{x} = \vec{b}$ сводится к последовательному решению двух систем с треугольными матрицами $U^T \vec{y} = \vec{b}$ и $U\vec{x} = \vec{y}$.

Первая из них имеет вид

$$\begin{cases} u_{11} y_1 = b_1, \\ u_{12} y_1 + u_{22} y_2 = b_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ u_{1n} y_1 + u_{2n} y_2 + \ldots + u_{nn} y_n = b_n, \end{cases}$$

откуда получаем вспомогательные неизвестные $y_1, y_2, \ldots, y_n$ по формулам

$$y_1 = \frac{b_1}{u_{11}}, \quad y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} u_{ki} y_k}{u_{ii}} \quad (i > 1). \qquad (4.25)$$

Из второй системы

$$\begin{cases} u_{11} x_1 + u_{12} x_2 + \ldots + u_{1n} x_n = y_1, \\ u_{22} x_2 + u_{2n} x_n = y_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ u_{nn} x_n = y_n \end{cases}$$

находим искомые значения x_i в обратном порядке, т.е. при $i = n, n-1, \ldots, 1$, по формулам

$$x_n = \frac{y_n}{u_{nn}}, \quad x_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^{n} u_{ik} x_k}{u_{ii}} \quad (i < n). \qquad (4.26)$$

Решение симметричных СЛАУ по формулам (4.24)-(4.26) называют методом квадратных корней или схемой Холецкого. В случае систем с положительно определенными матрицами можно ожидать хороших результатов применения такого метода (особенно если в процессе решения делать проверку на немалость u_{ii}, чтобы избежать большого роста погрешностей). В противном случае нет, например, гарантий, что в процессе разложения не появятся чисто мнимые числа, что, кстати, может не отразиться на результатах, если в алгоритме реализации метода квадратных корней предусмотреть возможность появления мнимых чисел.

4.7. Метод вращений

Как и в методе Гаусса, цель прямого хода преобразований в этом методе – приведение системы к треугольному виду последовательным обнулением поддиагональных элементов сначала первого столбца, затем второго и т.д. Делается это следующим образом.

Пусть c_{12} и s_{12} – некоторые отличные от нуля числа. Умножим первое уравнение системы

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \ldots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \qquad (4.27)$$

на c_{12}, второе – на s_{12} и сложим их. Полученным уравнением заменяем первое уравнение системы. Затем первое уравнение исходной системы умножаем на $-s_{12}$, второе – на c_{12} и результатом их сложения заменяем второе уравнение. Таким образом, первые два уравнения системы (4.27) заменяются уравнениями

$$(c_{12}a_{11} + s_{12}a_{21})x_1 + (c_{12}a_{12} + s_{12}a_{22})x_2 + \ldots + (c_{12}a_{1n} + s_{12}a_{2n})x_n = c_{12}b_1 + s_{12}b_2,$$

$$(-s_{12}a_{11} + c_{12}a_{21})x_1 + (-s_{12}a_{12} + c_{12}a_{22})x_2 + \ldots + (-s_{12}a_{1n} + c_{12}a_{2n})x_n = -s_{12}b_1 + c_{12}b_2.$$

На введенные два параметра c_{12} и s_{12} наложим два условия:

$-s_{12} a_{11} + c_{12} a_{21} = 0$ – условие обнуления (т.е. исключения x_1 из второго уравнения);

$c_{12}^2 + s_{12}^2 = 1$ – условие нормировки.

Легко проверить, что за c_{12} и s_{12}, удовлетворяющие этим условиям, можно принять, соответственно,

$$c_{12} = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}, \quad s_{12} = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}. \qquad (4.28)$$

Эти числа можно интерпретировать как синус и косинус некоторого угла α_1 (отсюда название «Метод вращений», так как один промежуточный шаг прямого хода такого метода может рассматриваться как преобразование вращения на угол α_1 расширенной матрицы системы в плоскости, определяемой индексами обнуляемого элемента).

После проведенных преобразований система (4.27) принимает вид

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)} x_1 + a_{12}^{(1)} x_2 + \ldots + a_{1n}^{(1)} x_n = b_1^{(1)}, \\ \qquad\quad a_{22}^{(1)} x_2 + \ldots + a_{2n}^{(1)} x_n = b_2^{(1)}, \\ a_{31} x_1 + a_{32} x_2 + \ldots + a_{3n} x_n = b_3, \\ \ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots \quad \ldots \\ a_{n1} x_1 + a_{n2} x_2 + \ldots + a_{nn} x_n = b_n, \end{cases} \qquad (4.29)$$

где

$$a_{1j}^{(1)} = c_{12} a_{1j} + s_{12} a_{2j}, \; j = 1, \ldots, n, \quad b_1^{(1)} = c_{12} b_1 + s_{12} b_2,$$

$$a_{2j}^{(1)} = -s_{12} a_{1j} + c_{12} a_{2j}, \; j = 2, 3, \ldots, n, \quad b_2^{(1)} = -s_{12} b_1 + c_{12} b_2.$$

Далее первое уравнение системы (4.29) заменяем новым, полученным сложением результатов умножения первого и третьего уравнений (4.29), $a_{11}^{(1)}$ a_{31} и

s
=
, а третье заменяем
соответственно, на c 13 =
13
(a 11 (1)) 2 + a 31 2
(a 11 (1)) 2 + a 31 2
уравнением, полученным сложением результатов умножения тех же
уравнений, соответственно, на − s 13 и c 13 . Получаем систему
⎧ a 11 (2) x 1 + a 12 (2) x 2 + ...
⎪
a 22 (1) x 2 + ...
⎪
⎪ ⎪
a 32 (1) x 2 + ...
⎨
⎪ a 41 x 1 + a 42 x 2 + ...
⎪ ...
...
...
... ...
⎪
⎪ ⎩ a n 1 x 1 + a n 2 x 2 + ...
+ a 1 (n 2) x n
+ a 2 (1 n) x n
+ a 3 (1 n) x n
+ a 4 n x n = b 1 (2) ,
= b 2 (1) ,
= b 3 (1) ,
= b 4 ,
...
...
+ a nn x n ... ...
= b n ,
где
a 1 (2 j) = c 13 a 1 (1 j) + s 13 a 3 j , j = 1 ,..., n , b 1 (2) = c 13 b 1 (1) + s 13 b 3 ,
a 3 (1 j) = − s 13 a 1 (1 j) + c 13 a 3 j , j = 2 , 3 ,..., n , b 3 (1) = − s 13 b 1 (1) + c 13 b 3 .
Проделав такие преобразования (n − 1) раз, приходим к системе
⎧ a 11 (n − 1) x 1
⎪
⎪
⎨
⎪
⎪ ⎩
+ a 12 (n − 1) x 2
a 22 (1) x 2
...
a n (1 2) x 2
+ ... + a 1 (n n − 1) x n
+ ... + a 2 (1 n) x n = b 1 (n − 1) ,
= b 2 (1) ,
... ...

+ ... + ...
= b n (1)
...
a nn (1) x n
(4.30)
такого же вида, какой приняла бы система (4.27) после первого этапа преобразований прямого хода метода Гаусса:
⎧ x 1
|
| |
⎨
|
|
| ⎩
+
c 12 x 2
a ~ 22 (1) x 2
a ~ 32 (1) x 2
+ c 13 x 3
+ a ~ 23 (1)
+ a ~ 33 (1)
...
...
a ~ x 2 +
(1)
n 2
...
a ~ n (1 3)
+ ... + c 1 n x n
+ ... + a ~ 2 (1 n) x n
+ ... + a ~ 3 (n 1) x n = y 1 ,
~
= b 2 (1) ,
~
= b 3 (1) ,
... ...
...
(
+ ... + a ~ nn 1) x n ... ...
~
= b n (1) .
(4.31)
120Однако в отличие от (4.31) система (4.30) обладает замечательным свойством: длина любого вектора-столбца расширенной матрицы системы (4.30) остается такой же, как у соответствующего столбца исходной системы. Чтобы убедиться в этом, достаточно посмотреть на результаты следующих преобразований, учитывающих условия нормировки:

$$(a_{1j}^{(1)})^2 + (a_{2j}^{(1)})^2 = c_{12}^2 a_{1j}^2 + 2 c_{12} s_{12} a_{1j} a_{2j} + s_{12}^2 a_{2j}^2 + s_{12}^2 a_{1j}^2 - 2 c_{12} s_{12} a_{1j} a_{2j} + c_{12}^2 a_{2j}^2 =$$
$$= (c_{12}^2 + s_{12}^2) a_{1j}^2 + (c_{12}^2 + s_{12}^2) a_{2j}^2 = a_{1j}^2 + a_{2j}^2 .$$

Это равенство показывает, что сохраняется величина суммы квадратов, изменяемых на данном промежуточном шаге преобразований, пары элементов любого столбца. Так как остальные элементы столбцов при этом остаются неизменными, то, значит, на любом этапе преобразований длина столбца будет одной и той же, т.е. не будет роста элементов матрицы и, тем самым, не будет нарастать вычислительная погрешность, несмотря на то, что коэффициенты пересчитываются $(n-1)$ раз.

Дальше точно так же за $(n-2)$ промежуточных шага преобразуем подсистему

$$\begin{cases} a_{22}^{(1)}x_2+\dots+a_{2n}^{(1)}x_n=b_2^{(1)},\\ \dots\ \dots\ \dots\ \dots\ \dots\ \dots\ \dots\\ a_{n2}^{(1)}x_2+\dots+a_{nn}^{(1)}x_n=b_n^{(1)},\end{cases}$$

системы (4.30), создавая нули под элементом $a_{22}^{(1)}$ и т.д.

В результате $(n-1)$ таких этапов прямого хода исходная система (4.27) будет приведена к треугольному виду

$$\begin{cases} a_{11}^{(n-1)}x_1+a_{12}^{(n-1)}x_2+\dots+a_{1n}^{(n-1)}x_n=b_1^{(n-1)},\\ \qquad\quad a_{22}^{(n-1)}x_2+\dots+a_{2n}^{(n-1)}x_n=b_2^{(n-1)},\\ \qquad\qquad\dots\ \dots\ \dots\ \dots\\ \qquad\qquad\qquad\qquad a_{nn}^{(n-1)}x_n=b_n^{(n-1)}.\end{cases}$$

Нахождение отсюда неизвестных $x_n, x_{n-1},\dots, x_1$ не отличается от рассмотренного ранее обратного хода метода Гаусса.

Метод вращений применим к любой системе $A\vec{x}=\vec{b}$ с невырожденной матрицей A и обладает хорошей вычислительной устойчивостью.

Метод вращений требует в четыре раза больше операций умножения, чем схема единственного деления.

Замечание. Для больших n схема единственного деления требует $O\left(\frac{n^3}{3}\right)$ умножений и делений, метод квадратных корней $-\ O\left(\frac{n^3}{6}\right)$, метод вращений $-\ O\left(\frac{4}{3}n^3\right)$, метод прогонки (он будет рассмотрен ниже) $-\ O(5n)$.