Численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений

Прямые методы

Курц В.В.

Санкт-Петербургский Политехнический университет Петра Великого

22 сентября 2023 г.

Линейная алгебра

Видео-курс по линейной алгебре by Prof. Gilbert Strang (MIT) https://ocw.mit.edu/courses/mathematics/18-06-linear-algebra-spring-2010/

Вычислительная линейная алгебра:

- 1. решение систем линейных алгебраических уравнений
- 2. определение собственных значений и собственных векторов

"75% всех расчетных математических задач приходится на решение систем линейных алгебраических уравнений."

Методы решения СЛАУ:

- 1. прямые (точные) "точные" значения неизвестных за конечное число арифметических операций
- 2. итерационные строится последовательность векторов, сходящаяся к решению.



Содержание

Постановка задачи

Решение простейших СЛАУ

Метод Гаусса и его модификации для решения СЛАУ

Обусловленность задачи решения СЛАУ

Решение СЛАУ, основанное на LDR-факторизации матрицы

Решение СЛАУ с использованием ортогональных матриц

Постановка задачи

Пусть дана система из n линейных уравнений с n неизвестными

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, i = 1, ..., n,$$
(1)

где x_j - неизвестные, a_{ij} - коэффициенты системы и b_i компоненты вектора правой части.

В матричной форме

$$Ax = b, (2)$$

где $A=(a_{ij})\in\mathbb{R}^{n\times n}$ - матрица коэффициентов, $b=(b_i)\in\mathbb{R}^n$ - вектор правой части и $x=(x_i)\in\mathbb{R}^n$ - вектор неизвестных.

Требуется найти x.

Корректность задачи

Если матрица A - неособенная, т.е. $det(A) \neq 0$, то система (2) имеет решение, причем единственное.

$$det(A) \neq 0 \Rightarrow \exists A^{-1}.$$

Домножим (2) слева и справа на A^{-1}

$$A^{-1}Ax = A^{-1}b, (3)$$

ИЛИ

$$x = A^{-1}b. (4)$$

Понятие приближенного решения

Пусть x^* - точное решение системы (2), \tilde{x} - решение, полученное с помощью численного метода.

Как оценить погрешность, если решение - это вектор?

Определение

Пусть x^* - точное решение системы (2). Тогда \tilde{x} называется приближенным решением с точностью ϵ , если

$$\|x^* - \tilde{x}\| < \epsilon, \tag{5}$$

где $\|\cdot\|$ - некоторая векторная норма.

$$\|x^*-\tilde{x}\|$$
 - абсолютная погрешность, $\frac{\|x^*-\tilde{x}\|}{\|x^*\|}$ - относительная погрешность.

Норма вектора

В \mathbb{R}^n задана норма, если каждому вектору $x \in \mathbb{R}^n$ сопоставлено вещественное число $\|x\|$, называемое нормой вектора x и обладающее следующими свойствами:

- 1. $||x|| \ge 0$, причем $||x|| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
- 2. $\|\alpha x\| = |\alpha| \|x\|, \forall x \in \mathbb{R}^n, \forall \alpha \in \mathbb{R}$
- 3. $||x + y|| \le ||x|| + ||y||, \forall x, y \in \mathbb{R}^n$

Норма вектора

Определение

Пусть $x=(x_1,...,x_n)^\intercal\in\mathbb{R}^n$ и $p\in\mathbb{R}$, причем $p\geq 1$. Тогда p-я норма вектора x есть

$$||x||_{p} = \left(\sum_{i=1}^{n} |x_{i}|^{p}\right)^{\frac{1}{p}} \tag{6}$$

Частные случаи:

- ▶ Манхэттеновская норма, p = 1: $||x||_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$
- ightharpoonup Евклидова норма, p=2: $\|x\|_2=\sqrt{\sum_{i=1}^n|x_i|^2}$
- lacktriangle бесконечная норма, $p=\infty$: $\|x\|_{\infty}=\max_{1\leq i\leq n}|x_i|$

Норма вектора

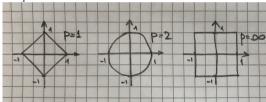
Пример

$$x = (3,4)^{\mathsf{T}}$$

 $||x||_1 = 7, ||x||_2 = 5, ||x||_{\infty} = 4$

Пример

$$\|x\|_p=1, p=1,2,\infty$$



MATLAB

norm(x), norm(x, 1), norm(x, Inf)



Содержание

Постановка задачи

Решение простейших СЛАУ

Метод Гаусса и его модификации для решения СЛАУ

Обусловленность задачи решения СЛАУ

Решение СЛАУ, основанное на LDR-факторизации матрицы

Решение СЛАУ с использованием ортогональных матриц

СЛАУ с диагональной матрицей

Большинство прямых методов основано на приведении СЛАУ к простейшим СЛАУ (диагональная или треугольная матрица коэффициентов).

A - диагональная матрица (diagonal matrix)

$$\begin{bmatrix}
d_1 & 0 & 0 \\
0 & d_2 & 0 \\
0 & 0 & d_3
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\
x_2 \\
x_3
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
b_1 \\
b_2 \\
b_3
\end{bmatrix}
\xrightarrow{x_1 = b_1/d_1} x_1 = b_1/d_1$$

$$\Rightarrow x_2 = b_2/d_2$$

$$x_3 = b_3/d_3$$

Если размерность системы n, то решение можно найти за n делений.

СЛАУ с треугольной матрицей

A - нижняя треугольная матрица (lower triangular matrix)

$$\underbrace{\begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{bmatrix}}_{A} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix} \xrightarrow{x_1 = b_1/l_{11}} x_1 = b_1/l_{11} \Rightarrow x_2 = (b_2 - l_{21}x_1)/l_{22} x_3 = (b_3 - l_{31}x_1 - l_{32}x_2)/l_{33}$$

Метод прямой подстановки (forward substitution method)

$$x_1 = \frac{b_1}{l_{11}}, x_i = \frac{1}{l_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} x_j \right), i = 2, ..., n.$$
 (7)

Упражнение

Вычислительная сложность метода прямой подстановки - $O(n^2)$.



СЛАУ с треугольной матрицей

A - верхняя треугольная матрица (upper triangular matrix)

$$\begin{bmatrix}
u_{11} & u_{12} & u_{13} \\
0 & u_{22} & u_{23} \\
0 & 0 & u_{33}
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix}
x_1 \\
x_2 \\
x_3
\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}
b_1 \\
b_2 \\
b_3
\end{bmatrix} \Rightarrow x_2 = (b_2 - u_{23}x_3)/u_{22} \\
x_1 = (b_3 - l_{13}x_3 - u_{12}x_1)/u_{11}$$

Метод обратной подстановки (backward substitution method)

$$x_{n} = \frac{b_{n}}{u_{nn}},$$

$$x_{i} = \frac{1}{u_{ii}} \left(b_{i} - \sum_{j=i+1}^{n} u_{ij} x_{j} \right), i = n - 1, ..., 1.$$
(8)

Вычислительная сложность метода обратной подстановки - $O(n^2)$.

СЛАУ с трехдиагональной матрицей

A - трехдиагональная матрица

$$\begin{bmatrix} c_1 & d_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ b_2 & c_2 & d_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & c_3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_{n-1} & d_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & b_n & c_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \vdots \\ r_{n-1} \\ r_n \end{bmatrix}$$

Причем
$$b_1 = 0, d_n = 0$$

Уравнение под номером i содержит только 3 неизвестных x_{i-1}, x_i, x_{i+1} :

$$b_i x_{i-1} + c_i x_i + d_i x_{i+1} = r_i (9)$$

СЛАУ с трехдиагональной матрицей. Метод прогонки (Thomas Algorithm)

Пусть $\exists \delta_i, \lambda_i$:

$$x_i = \delta_i x_{i+1} + \lambda_i, i = 1, \dots, n \tag{10}$$

$$x_{i-1} = \delta_{i-1} x_i + \lambda_{i-1} \tag{11}$$

$$(11) \to (9): b_i(\delta_{i-1}x_i + \lambda_{i-1}) + c_ix_i + d_ix_{i+1} = r_i$$

$$x_{i} = -\frac{d_{i}}{b_{i}\delta_{i-1} + c_{i}} x_{i+1} + \frac{r_{i} - b_{i}\lambda_{i-1}}{b_{i}\delta_{i-1} + c_{i}}$$
(12)

(10), (12) \Rightarrow рекуррентные соотношения для δ_i and λ_i :

$$\delta_{i} = -\frac{d_{i}}{b_{i}\delta_{i-1} + c_{i}}, \lambda_{i} = \frac{r_{i} - b_{i}\lambda_{i-1}}{b_{i}\delta_{i-1} + c_{i}}, i = 1, \dots, n$$
(13)



Метод прогонки (Thomas Algorithm)

1. Прямой ход

$$i=1:b_1=0\implies \delta_1=-rac{d_1}{c_1}, \lambda_1=rac{r_1}{c_1}$$
 $i=2,\dots,n-1:$ формула (13) $i=n:d_n=0\implies \delta_n=0, \lambda_n=rac{r_n-b_n\lambda_{n-1}}{b_n\delta_{n-1}+c_n}$

2. Обратный ход

$$i=n: x_n=\lambda_n$$
 $i=n-1,\ldots,1:$ формула (10) для вычисления x_i

Метод прогонки требует выполнения $\mathcal{O}(n)$ арифметических операций.



Корректность и устойчивость метода прогонки

Возможные проблемы

- 1. Деление на 0 в формуле (13).
- 2. Нарастание погрешностей при вычислении x_i по формуле (10), если $|\delta_i| > 1$.

Достаточные условия

Метод прогонки будет корректным и устойчивым, если коэффициенты матрицы A удовлетворяют условиям диагонального преобладания

$$|c_i| > |b_i| + |d_i| \quad \forall i = 1, \ldots, n.$$

Содержание

Постановка задачи

Решение простейших СЛАУ

Метод Гаусса и его модификации для решения СЛАУ

Обусловленность задачи решения СЛАУ

Решение СЛАУ, основанное на LDR-факторизации матрицы

Решение СЛАУ с использованием ортогональных матриц

Элементарные операции над строками

Ax = b, (A|b) - расширенная матрица (augmented matrix).

$$\begin{cases} x_1 + x_2 = 2 \\ 2x_1 - x_2 = 1 \end{cases} \qquad \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

1. Перестановка строк

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_1 \leftrightarrow R_2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

2. Домножение на ненулевое число

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_1 := 2R_1} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

3. Сложение строк

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 := R_2 + 2R_1} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 4 & 1 & 5 \end{pmatrix}$$

Подматрицы и миноры

Определение

Пусть A - матрица размерности $n \times n$. Матрица $A_k = A(1:k,1:k)$ называется ведущей главной подматрицей порядка k.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} & \dots & a_{kn} \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nk} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \qquad A_k = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1k} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{k1} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix}$$

Определение

Ведущий k-й угловой минор A - это определитель ведущей главной подматрицы A_k

$$d_k = \det A_k$$
.

Метод Гаусса (the Gaussian Elimination Method)

$$(A|b) \xrightarrow{\text{прямой ход}} (U|\tilde{b}) \xrightarrow{\text{обратный ход}} x^*$$

$$\begin{cases} 2x_1 + 4x_2 + 6x_3 = 4 \\ x_1 + 5x_2 + 9x_3 = 2 \\ 2x_1 + x_2 + 3x_3 = 7 \end{cases}$$

1. Прямой ход (forward elimination):

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 & | & 4 \\ 1 & 5 & 9 & | & 2 \\ 2 & 1 & 3 & | & 7 \end{pmatrix}}_{A} \xrightarrow{R_{2} - \frac{1}{2}R_{1}} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 & | & 4 \\ 0 & 3 & 6 & | & 0 \\ 0 & -3 & -3 & | & 3 \end{pmatrix}}_{A} \xrightarrow{R_{3} - \frac{-3}{3}R_{2}} \underbrace{\begin{pmatrix} 2 & 4 & 6 & | & 4 \\ 0 & 3 & 6 & | & 0 \\ 0 & 0 & 3 & | & 3 \end{pmatrix}}_{U}$$

2. Обратный ход (backward substitution): $\begin{cases} 3x_3 = 3 \Rightarrow x_3 = 1 \\ 3x_2 + 6x_3 = 0 \Rightarrow x_2 = -2 \\ 2x_1 + 4x_2 + 6x_3 = 4 \Rightarrow x_1 = 3 \end{cases}$



Метод Гаусса

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$$
, $\det A \neq 0$, $Ax = b$. Пусть $A^{(1)} := A$, $b^{(1)} := b$, $A^{(1)}x = b^{(1)}$.

$$\begin{pmatrix}
a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\
a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\
a_{n1}^{(1)} & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)}
\end{pmatrix} b_{1}^{(1)} b_{2}^{(1)} \\
a_{11}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}a_{1j}^{(1)}, \\
b_{i}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - m_{i1}b_{1}^{(1)}, \\
b_{i}^{(2)} = b_{i}^{(1)} - m_{i1}b_{1}^{(1)}, i, j = 2, \dots, n$$

$$\begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{pmatrix} \begin{vmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b_n^{(2)} \end{vmatrix} a_{22}^{(2)} \neq 0, m_{i2} = \frac{a_{i2}^{(2)}}{a_{22}^{(2)}}, i = 3, \dots, n$$

$$\begin{vmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n2}^{(2)} & \dots & a_{nn}^{(2)} \end{vmatrix} b_2^{(1)} b_2^{(2)} + a_{12}^{(2)} a_{22}^{(2)} +$$

Метод Гаусса

$$\left(A^{(1)}|b^{(1)}\right) \xrightarrow{\{m_{i1}\}_{i=2}^n \atop a_{11}^{(1)} \neq 0} \left(A^{(2)}|b^{(2)}\right) \to \ldots \to \left(A^{(k)}|b^{(k)}\right) \xrightarrow{\{m_{ik}\}_{i=k+1}^n \atop a_{kk}^{(k)} \neq 0} \left(A^{(k+1)}|b^{(k+1)}\right) \to \ldots \to \left(A^{(n)}|b^{(n)}\right), U = A^{(n)}, \tilde{b} = b^{(n)}$$

 $a_{kk}^{(k)}$ - ведущие элементы, должны быть отличными от 0.

Пример

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 5 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}, \det A \neq 0, A^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -6 & -12 \end{pmatrix}$$

Метод Гаусса прерывается на втором шаге, т.к. $a_{22}^{(2)} = 0$.

Метод Гаусса

Условия применимости метода Гаусса

Если
$$d_k \neq 0$$
 for $k = 1, \ldots, n-1$, то $a_{kk}^{(k)} \neq 0, k = 1, \ldots, n-1$.

Вычислительная сложность

Для нахождения решения с помощью метода Гаусса требуется $O(n^3)$ арифметических операций.

Что будет, если ведущие элементы ненулевые, но близки к нулю?

Метод Гаусса. Неустойчивость

Решим СЛАУ на 5-разрядной десятичной ЭВМ методом Гаусса.

$$\begin{pmatrix}
10 & -7 & 0 & 7 \\
-3 & 2.099 & 6 & 3.901 \\
5 & -1 & 5 & 6
\end{pmatrix}
\rightarrow
\begin{pmatrix}
10 & -7 & 0 & 7 \\
0 & -0.001 & 6 & 6.001 \\
0 & 2.5 & 5 & 2.5
\end{pmatrix}$$

$$(5 + (2.5 \cdot 10^3)(6))x_3 = (2.5 + (2.5 \cdot 10^3)(6.001))$$
(14)

$$(5+1.5000\cdot 10^4)x_3 = (2.5+1.50025\cdot 10^4)$$
 (15)

$$1.5005 \cdot 10^4 x_3 = 1.5004 \cdot 10^4 \tag{16}$$

$$x_3 = \frac{1.5004 \cdot 10^4}{1.5005 \cdot 10^4} = 0.99993$$

$$-0.001x_2 + (6)(0.99993) = 6.001 \Rightarrow x_2 = \frac{1.5 \cdot 10^{-3}}{-1.0 \cdot 10^{-3}} = -1.5$$

$$10x_1 + (-7)(-1.5) = 7 \Rightarrow x_1 = -0.35$$

Получили $(-0.35, -1.5, 0.99993)^T$, точное решение - $(0, -1, 1)^T$.



Причина неустойчивости метода Гаусса - возможность неограниченного роста (по модулю) элементов промежуточных матриц $A^{(2)}, A^{(3)}, \dots, A^{(n)}$.

Минимизируем возрастание элементов матриц на каждом шаге

$$a_{ij}^{(k+1)} = a_{ij}^{(k)} - m_{ik} a_{kj}^{(k)}, m_{ik} = \frac{a_{ik}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}$$

$$(17)$$

за счет выбора ведущего элемента $a_{kk}^{(k)}$.

Метод Гаусса с выбором ведущего элемента по столбцу

На шаге k прямого хода:

```
выбрать ведущий элемент как максимальный по модулю в столбце A^{(k)}(k:n,k), т.е. найти m \geq k: |a_{mk}| = \max_{i \geq k} |a_{ik}| если a_{mk} \neq 0 поменять местами k-ую и m-ую строки расширенной матрицы (A|b) иначе остановиться
```

Алгоритм с выбором ведущего элемента

- 1. позволяет сократить погрешность, вызванную ошибками округления.
- 2. увеличивает вычислительные затраты на $O(n^2)$ операций, что практически не влияет на общую трудоемкость.



Метод Гаусса с выбором ведущего элемента по столбцу

$$\begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & -0.001 & 6 & 6.001 \\ 0 & 2.5 & 5 & 2.5 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 \leftrightarrow R_3} \begin{pmatrix} 10 & -7 & 0 & 7 \\ 0 & 2.5 & 5 & 2.5 \\ 0 & -0.001 & 6 & 6.001 \end{pmatrix}$$

$$(6 + \left(\frac{10^{-3}}{2.5}\right)(5))x_3 = (6.001 + \left(\frac{10^{-3}}{2.5}\right)(2.5)) \tag{18}$$

$$6.002x_3 = 6.002x_3 \tag{19}$$

$$x_3 = 1$$

 $2.5x_2 + (5)(1) = 2.5 \Rightarrow x_2 = -1$
 $10x_1 + (-7)(-1) = 7 \Rightarrow x_1 = 0$.

Полученное решение совпало с точным.

Обусловленность вычислительного алгоритма

Чувствительность результата работы алгоритма к малым, но неизбежным ошибкам округления - обусловленность вычислительного алгоритма.

Хорошо обусловленный алгоритм - малые относительные погрешности округления (порядка ϵ_M) приводят к малой относительной вычислительной погрешности $\delta(\tilde{x})$ результата \tilde{x} .

Количественная мера степени обусловленности - число обусловленности K

$$\delta(\tilde{x}) \le K \cdot \epsilon_M. \tag{20}$$

Выбор ведущего элемента по столбцу позволяет улучшить обусловленость вычислительного алгоритма.



Метод Гаусса с выбором ведущего элемента по всей матрице

Ведущий элемент можно искать по всей матрице - схема полного выбора:

- © скорость роста элементов существенно замедляется по сравнению с выбором по столбцу.
- \odot скорость работы алгоритма падает, т.к. поиск по всей матрице требует $O(n^3)$ операций сравнения.

Содержание

Постановка задачи

Решение простейших СЛАУ

Метод Гаусса и его модификации для решения СЛАУ

Обусловленность задачи решения СЛАУ

Решение СЛАУ, основанное на LDR-факторизации матрицы

Решение СЛАУ с использованием ортогональных матриц

Норма матрицы

Величина

$$||A|| = \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||}{||x||} = \max_{||y||=1} ||Ay||$$
 (21)

называется нормой матрицы A, подчиненной векторной норме.

Замечание

Норма матрицы - максимальный коэффициент растяжения векторов под действием матрицы.

Матричная норма (22) обладает теми же свойствами, что и векторная норма. В дополнение верно:

- 1. $||Ax|| \le ||A|| \, ||x|| \, , \forall A, x$
- 2. $||AB|| \le ||A|| \, ||B|| \, , \forall A, B$

Упражнение

Доказать данные неравенства.



Подчиненные нормы

- $||A||_1 = \max_{1 \le j \le n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$
- $\|A\|_{\infty} = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$
- $lackbox \|A\|_2 = \max_{1 \leq j \leq n} \sqrt{\lambda_j(A^\intercal A)},$ где $\lambda_j(A^\intercal A)$ собственное число матрицы $A^\intercal A.$

Замечание

Вычисление $\|A\|_2$ - сложная задача. Можно воспользоваться неравенством

$$||A||_2 \le ||A||_F, \tag{22}$$

где
$$\|A\|_F = \sqrt{\sum\limits_{i,j=1}^n \left|a_{ij}\right|^2}$$
 - норма Фробениуса.

Другие неравенства можно найти в книге Quarteroni et al.

Подчиненные нормы. Пример

$$A = \begin{pmatrix} -4 & 4 \\ -2 & -4 \end{pmatrix}$$

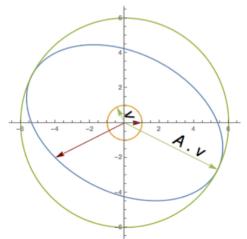
$$||A||_1 = \max(4+2,4+4) = 8$$

$$||A||_{\infty} = \max(4+4,2+4) = 8$$

$$||A||_F = \sqrt{4^2 + 4^2 + 2^2 + 4^2} \approx 7.2$$

$$||A||_2 = 6$$

$$||A|| = \max_{||x||=1} ||Ax||$$



Число обусловленности матрицы (the condition number of a matrix)

$$\begin{cases} x_1 + 10x_2 = 11 \\ 100x_1 + 1001x_2 = 1101 \end{cases}$$
 $\det A = 1 \cdot 1001 - 100 \cdot 10 = 1 \neq 0 \Rightarrow \exists !$ решение: $x_1 = 1, x_2 = 1$.
$$\begin{cases} x_1 + 10x_2 = 11.01 \\ 100x_1 + 1001x_2 = 1101 \end{cases}$$

 $x_1 = 11.01, x_2 = 0.$

Малые изменения входных данных ightarrow большие изменения в решении.

Число обусловленности матрицы

$$Ax=b o A(x+\delta x)=b+\delta b$$
 δb - возмущение входных данных, δx - возмущение решения.

$$||b|| \le ||A|| \, ||x|| \, , ||\delta x|| \le ||A^{-1}|| \, ||\delta b|| \Rightarrow ||b|| \, ||\delta x|| \le ||A|| \, ||x|| \, ||A^{-1}|| \, ||\delta b||$$

$$\underbrace{||\delta x||}_{\text{относительная}} \le ||A|| \, ||A^{-1}|| \, \frac{||\delta b||}{||b||} = cond(A) \underbrace{\frac{||\delta b||}{||b||}}_{\text{относительная}}$$
относительная погрешность b

Определение

Число обусловленности матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$$cond(A) = ||A|| ||A^{-1}||.$$
 (24)



Пример (продолжение)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 10 \\ 100 & 1001 \end{pmatrix}, \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} 1001 & -10 \\ -100 & 1 \end{pmatrix}$$
$$\|A\|_{\infty} = \max(1+10,100+1001) = 1101,$$
$$\|A^{-1}\|_{\infty} = \max(1001+10,100+1) = 1011$$
$$\Rightarrow \operatorname{cond}_{\infty}(A) = 1101 \cdot 1011 > 10^{6}$$
$$\frac{\|\delta b\|_{\infty}}{\|b\|_{\infty}} \approx 10^{-5}$$
$$\frac{\|\delta x\|_{\infty}}{\|x\|_{\infty}} = 11.01$$

Число обусловленности матрицы. Свойства.

$$\|A\|=\max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}=k_{max}$$
 $\|A^{-1}\|=\max_{y\neq 0} \frac{\|A^{-1}y\|}{\|y\|}=\max_{x\neq 0} \frac{\|x\|}{\|Ax\|}=\frac{1}{\min\limits_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}}=\frac{1}{k_{min}}, k_{min}$ - минимальный коэффициент растяжения.

 $\Rightarrow cond(A) = rac{k_{max}}{k_{min}}$ - отношение максимального коэффициента растяжения векторов под действием A к минимальному коэффициенту.

- 1. cond(E) = 1
- 2. $cond(A) \ge 1$ $E = AA^{-1}$ $1 \le ||A|| ||A^{-1}||$
- 3. $cond(\alpha A) = cond(A)$ $(\alpha A)^{-1} = \frac{1}{\alpha}A^{-1}$

Число обусловленности матрицы

Число обусловленности матрицы отражает чувствительность решения задачи Ax = b к изменениям входных данных (матрица A и вектор b).

Матрица A называется nnoxo обусловленной (ill-conditioned), если cond(A) "велико" (зависит от конкретной задачи), в противном случае матрица A - xopouo обусловленная (well-conditioned).

Упражнение

Пусть матрица A получила некоторое возмущение δA

$$Ax = b \rightarrow (A + \delta A)(x + \delta x) = b.$$

Вывести оценку, подобную (23).

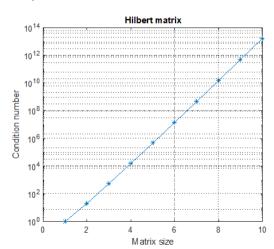


Пример плохо обусловленной матрицы

Матрица Гильберта H - квадратная матрица с элементами

$$h_{ij} = \frac{1}{i+j-1}.$$

```
The Hilbert matrices are canonical
   examples of ill-conditioned matrices
 cond h = zeros(size(N));
 \exists for i = 1 : length(N) 
      cond h(i) = cond(hilb(N(i)));
 end
 figure
 semilogy(N, cond h, '*-');
 grid on
 xlabel('Matrix size');
 ylabel('Condition number');
 title('Hilbert matrix')
```



Содержание

Постановка задачи

Решение простейших СЛАУ

Метод Гаусса и его модификации для решения СЛАУ

Обусловленность задачи решения СЛАУ

Решение СЛАУ, основанное на LDR-факторизации матрицы

Решение СЛАУ с использованием ортогональных матриц

LDR-факторизация

 $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, Ax = b, $\det A \neq 0 \Rightarrow \exists !$ решение.

$$L = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix}}_{\text{нижняя унитреугольная}}, D = \underbrace{\begin{pmatrix} d_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & d_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & d_n \end{pmatrix}}_{\text{диагональная}}, R = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & r_{12} & \dots & r_{1n} \\ 0 & 1 & \dots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}}_{\text{верхняя унитреугольная}}$$

LDR-факторизация

Теорема

Пусть все угловые миноры матрицы A отличны от 0. Тогда $\exists !\, L, D, R$, такие что

$$A = LDR$$
,

где D - диагональная матрица, L и R - нижняя и верхняя унитреугольные матрицы.

Методы, основанные на LDR разложении

1. LDR разложение

2. LU разложение, причем
$$U = DR$$
, $U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$ $Ax = b \Leftrightarrow L(Ux) = b \Leftrightarrow \begin{cases} Ly & = b \\ Ux & = y \end{cases}$

- 3. LDL^{\top} разложение. Пусть A симметричная матрица. Тогда $A=LDL^{\top}$.
- 4. Схема Холецкого, или метод квадратного корня (The Cholesky factorization). Пусть A симметричная и положительно определенная матрица. Тогда $A = SS^{\top}$, где S нижняя треугольная матрица.

$$Ax = b \Leftrightarrow S(S^{\top}x) = b \Leftrightarrow \begin{cases} Sy &= b \\ S^{\top}x &= y \end{cases}$$

LDR-факторизация

$$A = LDR \Leftrightarrow a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} d_k r_{kj}$$
 (26)

Шаг 1.
$$a_{11} = \sum_{k=1}^{n} l_{1k} d_k r_{k1} = l_{11} d_1 r_{11} \Rightarrow d_1 = a_{11}$$
 $j > 1 : a_{1j} = l_{11} d_1 r_{1j} + \underbrace{l_{12} d_2 r_{2j} + \dots}_{=0} = l_{11} d_1 r_{1j} \Rightarrow r_{1j} = \frac{a_{1j}}{d_1}$
 $i > 1 : a_{i1} = l_{i1} d_1 r_{11} + \underbrace{l_{i2} d_2 r_{21} + \dots}_{=0} = l_{i1} d_1 r_{11} \Rightarrow l_{i1} = \frac{a_{i1}}{d_1}$

Шаг 2. $a_{22} = \underbrace{l_{21} d_1 r_{12}}_{\text{уже найдены}} + l_{22} d_2 r_{22} + \underbrace{l_{23} d_3 r_{32} + \dots}_{=0} \Rightarrow d_2 = a_{22} - l_{21} d_1 r_{12}$
 $j > 2 : a_{2j} = l_{21} d_1 r_{1j} + l_{22} d_2 r_{2j} + 0 \Rightarrow r_{2j} = \frac{a_{2j} - l_{21} d_1 r_{1j}}{d_2}$
 $i > 2 : a_{i2} = l_{i1} d_1 r_{12} + l_{i2} d_2 r_{22} + 0 \Rightarrow l_{i2} = \underbrace{a_{i2} - l_{i1} d_1 r_{12}}_{d_2}$

• • •

LDR-факторизация. Шаг m

$$a_{mm} = \underbrace{\sum_{k=1}^{m-1} l_{mk} d_k r_{km}}_{\text{уже найдены}} + l_{mm} d_m r_{mm} + 0 \Rightarrow d_m = a_{mm} - \sum_{k=1}^{m-1} l_{mk} d_k r_{km}$$
 (m.1)

$$j > m : a_{mj} = \sum_{k=1}^{m-1} l_{mk} d_k r_{kj} + l_{mm} d_m r_{mj} + 0 \Rightarrow r_{mj} = \frac{a_{mj} - \sum_{k=1}^{m-1} l_{mk} d_k r_{kj}}{d_m}$$
 (m.2)

$$i > m : a_{im} = \sum_{k=1}^{m-1} l_{ik} d_k r_{km} + l_{im} d_m r_{mm} + 0 \Rightarrow l_{im} = \frac{a_{im} - \sum_{k=1}^{m-1} l_{ik} d_k r_{km}}{d_m}$$
 (m.3)

Вычислительная сложность

Для нахождения LDR разложения требуется порядка $\frac{2n^3}{3}$ арифметических операций.

LDL^{\top} -факторизация

$$A = A^{\top} \Rightarrow R = L^{\top}.$$

Для нахождения коэффициентов матриц L и D используются формулы (m.1) и (m.3).

Вычислительная сложность

Этот метод более экономичный, так как учитывает симметричность матрицы. Вычислительные затраты уменьшаются примерно вдвое по сравнению с LDR-факторизацией. Для нахождения LDL^{\top} разложения требуется порядка $\frac{n^3}{3}$ арифметических операций.

LU-факторизация

Теорема о LU разложении

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Если все угловые миноры матрицы A отличны от 0, то существует единственная нижняя унитреугольная матрица L и единственная верхняя треугольная матрица U, такие что A = LU.

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

Вычислительная сложность

Для нахождения LU разложения требуется порядка $\frac{2n^3}{3}$ арифметических операций.



Доказательство теоремы

<u>База</u>: n=1. Для ведущей главной подматрицы A_1 матрица L=1 и матрица $U=a_{11}$. Индукционный переход. Пусть для A_{k-1} существует единственное LU-разложение

$$A_{k-1} = L_{k-1} U_{k-1}. (27)$$

Докажем, что для A_k тоже существует LU разложение и оно единственно.

$$A_k = \begin{bmatrix} A_{k-1} & f_{k-1} \\ g_{k-1}^{\top} & a_{kk} \end{bmatrix}, L_k = \begin{bmatrix} L_{k-1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{x}_{k-1}^{\top} & 1 \end{bmatrix}, U_k = \begin{bmatrix} U_{k-1} & y_{k-1} \\ \mathbf{0}^{\top} & u_{kk} \end{bmatrix}, \tag{28}$$

где $f_{k-1},g_{k-1}\in\mathbb{R}^{n-1}$ - известны, $\mathbf{0}\in\mathbb{R}^{n-1},x_{k-1},y_{k-1}\in\mathbb{R}^{n-1}$ - нужно найти.

Доказательство теоремы (продолжение)

$$A_{k} = \begin{bmatrix} A_{k-1} & f_{k-1} \\ g_{k-1}^{-1} & a_{kk} \end{bmatrix} = L_{k}U_{k} = \begin{bmatrix} L_{k-1}U_{k-1} & L_{k-1}y_{k-1} \\ x_{k-1}^{-1}U_{k-1} & x_{k-1}^{-1}y_{k-1} + u_{kk} \end{bmatrix}.$$
(29)

$$\Leftrightarrow \begin{cases} A_{k-1} &= L_{k-1}U_{k-1} \\ f_{k-1} &= L_{k-1}y_{k-1} \\ g_{k-1}^{\top} &= x_{k-1}^{\top}U_{k-1} \\ a_{kk} &= x_{k-1}^{\top}y_{k-1} + u_{kk} \end{cases}$$
(30)

$$det(L_{k-1}) \neq 0 \Rightarrow \exists ! y_{k-1},$$

 $det(U_{k-1}) \neq 0 \Rightarrow \exists ! x_{k-1},$

 u_{kk} находится из последнего равенста в системе (30).

LU-факторизация

$$A = LU \Leftrightarrow a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} l_{ik} u_{kj}$$
(31)

IIIar 1.
$$j \ge 1$$
: $a_{1j} = l_{11}u_{1j} + \underbrace{l_{12}u_{2j} + \dots}_{=0} \Rightarrow u_{1j} = a_{1j}$

$$i > 1: a_{i1} = l_{i1}u_{11} + \underbrace{l_{i2}u_{21} + \dots}_{=0} \Rightarrow l_{i1} = \underbrace{a_{i1}}_{u_{11}}$$

Шаг
$$m.\ j \geq m: a_{mj} = \sum_{\substack{k=1 \ \text{уже известно}}}^{m-1} l_{mk} u_{kj} + l_{mm} u_{mj} + 0 \Rightarrow u_{mj} = a_{mj} - \sum_{k=1}^{m-1} l_{mk} u_{kj}$$

$$i > m: a_{im} = \sum_{k=1}^{m-1} l_{ik} u_{km} + l_{im} u_{mm} + 0 \Rightarrow l_{im} = \frac{a_{im} - \sum_{k=1}^{m-1} l_{ik} u_{km}}{u_{mm}}$$

Положительно определенная матрица

Определение

Симметричная матрица $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ называется положительно определенной, если $x^{\top}Ax > 0$ для любого ненулевого вектора $x \in \mathbb{R}^n$.

Пример

Let
$$A = \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 10 \end{pmatrix}$$
 if $x = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix}^{\top}$.

$$x^{\top}Ax = \begin{pmatrix} x_1 & x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 6 \\ 6 & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 4x_1^2 + 12x_1x_2 + 10x_2^2 = (2x_1 + 3x_2)^2 + x_2^2 > 0$$

 \Rightarrow A - положительно определенная матрица.

Схема Холецкого, или метод квадратного корня

Теорема

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ - симметричная и положительно определенная матрица. Тогда существует единственная нижняя треугольная матрица S, такая что $A = SS^{\top}$.

$$S = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 & \dots & 0 \\ s_{21} & s_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ s_{n1} & s_{n2} & \dots & s_{nn} \end{pmatrix}$$

Такая факторизация называется разложением Холецкого.

Вычислительная сложность

Для нахождения разложения Холецкого требуется порядка $\frac{n^3}{3}$ арифметических операций.

Разложение Холецкого

$$A = SS^{\top} \Leftrightarrow a_{ij} = \sum_{k=1}^{n} s_{ik} s_{kj}^{\top} = \sum_{k=1}^{n} s_{ik} s_{jk}$$
 (32)

IIIar 1.
$$a_{11} = s_{11}^2 + \underbrace{s_{12}^2 + \dots}_{=0} \Rightarrow s_{11} = \sqrt{a_{11}}$$

 $j > 1 : a_{1j} = s_{11}s_{j1} + \underbrace{s_{12}s_{j2} + \dots}_{=0} \Rightarrow s_{j1} = \frac{a_{1j}}{s_{11}}$

Шаг
$$m$$
. $a_{mm} = \sum_{k=1}^{m-1} s_{mk}^2 + s_{mm}^2 + \sum_{k=m+1}^{n} s_{mk}^2 \Rightarrow s_{mm} = \sqrt{a_{mm} - \sum_{k=1}^{m-1} s_{mk}^2}$

$$j > m : a_{mj} = \sum_{k=1}^{m-1} s_{mk} s_{jk} + s_{mm} s_{jm} + \sum_{k=m+1}^{n} s_{mk} s_{jk} \Rightarrow s_{jm} = \frac{a_{mj} - \sum_{k=1}^{m-1} s_{mk} s_{jk}}{s_{mm}}$$

Метод Гаусса и LU разложение

Прямой ход метода Гаусса:

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 4 & 4 & -4 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 - \frac{4}{2}R_1} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 0 & 2 & -14 \\ 0 & \frac{5}{2} & -\frac{3}{2} \end{pmatrix} \xrightarrow{R_3 - \frac{5}{4}R_2} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 0 & 2 & -14 \\ 0 & 0 & 16 \end{pmatrix}$$

LU разложение матрицы A:

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & \frac{5}{4} & 1 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 0 & 2 & -14 \\ 0 & 0 & 16 \end{pmatrix}$$

- ► LU разложение существует не для любой невырожденной матрицы.
- ► Как улучшить устойчивость метода, использующего LU разложение?
- → LU разложение с выбором ведущего элемента...

Матрица перестановки

Матрица перестановки получается из единичной матрицы перестановкой строк.

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Умножение слева на матрицу P_{12} меняет местами 1-ю и 2-ю строки матрицы A:

$$P_{12}A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 4 & 4 & -4 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 2 & 1 & 5 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix}.$$

LUP разложение

PA = LU, P - матрица перестановок $\Rightarrow LUx = Pb$.

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 5 \\ 4 & 4 & -4 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_1 \leftrightarrow R_2} \begin{pmatrix} 4 & 4 & -4 \\ 2 & 1 & 5 \\ 1 & 3 & 1 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 - \frac{2}{4}R_1} \begin{pmatrix} 4 & 4 & -4 \\ \frac{2}{4} & -1 & 7 \\ \frac{1}{4} & 2 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 \leftrightarrow R_3}$$

$$\begin{pmatrix}
4 & 4 & -4 \\
\frac{1}{4} & 2 & 2 \\
\frac{2}{4} & -1 & 7
\end{pmatrix} \xrightarrow{R_3 - \frac{-1}{2}R_2} \begin{pmatrix}
4 & 4 & -4 \\
\frac{1}{4} & 2 & 2 \\
\frac{2}{4} & -\frac{1}{2} & 8
\end{pmatrix}$$

$$E = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 1
\end{pmatrix} \xrightarrow{R_1 \leftrightarrow R_2} \begin{pmatrix}
0 & 1 & 0 \\
1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1
\end{pmatrix} \xrightarrow{R_2 \leftrightarrow R_3} \begin{pmatrix}
0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 1 \\
1 & 0 & 0
\end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 \\
\frac{1}{4} & 1 & 0 \\
\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 1
\end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix}
4 & 4 & -4 \\
0 & 2 & 2 \\
0 & 0 & 8
\end{pmatrix}, P = \begin{pmatrix}
0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 1 \\
1 & 0 & 0
\end{pmatrix}$$

Содержание

Постановка задачи

Решение простейших СЛАУ

Метод Гаусса и его модификации для решения СЛАУ

Обусловленность задачи решения СЛАУ

Решение СЛАУ, основанное на LDR-факторизации матрицы

Решение СЛАУ с использованием ортогональных матриц

Методы ортогонализации

Пусть $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ и $det(A) \neq 0$. Тогда

$$A = QR, (33)$$

где Q - ортогональная матрица, т.е. $Q^{\top} = Q^{-1}$, R - правая (верхняя) треугольная матрица.

$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Rx = Q^{\top}b. \tag{34}$$

Свели исходную задачу к решению СЛАУ с правой треугольной матрицей.

Скалярное произведение и норма в пространстве \mathbb{R}^n

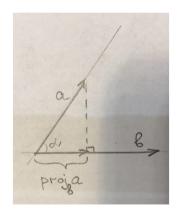
$$(x,y) = x^{\top} y = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i, ||x||^2 = (x,x).$$
 (35)

Ортогональные векторы

$$(x,y) = 0. (36)$$

Проекция вектора a на вектор b

$$proj_b a = ||a|| \cos(\alpha) \frac{b}{||b||} = \frac{(a,b)}{(b,b)} b.$$
 (37)



Метод Грама-Шмидта

 $det(A) \neq 0 \Rightarrow$ все столбцы матрицы A линейно независимы.

 $A = [a^{(1)}a^{(2)}\dots a^{(n)}]$, где $a^{(i)}$ - i-ый столбец матрицы A.

Столбцы $a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(n)}$ образуют базис в n-мерном пространстве, так как они линейно независимы и их количество совпадает с размерностью пространства.

Построим ортонормированный базис $q^{(1)}, q^{(2)}, \dots, q^{(n)}$

$$(q^{(i)}, q^{(j)}) = \delta_{ij} \tag{38}$$

на основе $a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(n)}$ по алгоритму Грама-Шмидта.



Метод Грама-Шмидта. Случай \mathbb{R}^3

Первый вектор ортонормированного базиса

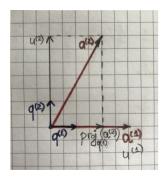
$$u^{(1)} = a^{(1)}, q^{(1)} = \frac{u^{(1)}}{\|u^{(1)}\|} = \rho_{11}a^{(1)}.$$
 (39)

Второй вектор ортонормированного базиса

$$u^{(2)} = a^{(2)} - proj_{q^{(1)}}(a^{(2)}) = a^{(2)} - (a^{(2)}, q^{(1)})q^{(1)}.$$
 (40)

Тогда

$$q^{(2)} = \frac{u^{(2)}}{\|u^{(2)}\|} = \rho_{22}a^{(2)} + \rho_{21}a^{(1)}. \tag{41}$$



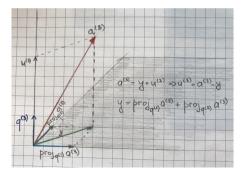
Метод Грама-Шмидта. Случай \mathbb{R}^3

Третий вектор ортонормированного базиса

$$u^{(3)} = a^{(3)} - proj_{q^{(1)}}(a^{(3)}) - proj_{q^{(2)}}(a^{(3)}) = a^{(3)} - (a^{(3)}, q^{(1)})q^{(1)} - (a^{(3)}, q^{(2)})q^{(2)}.$$
(42)

Тогда

$$q^{(3)} = \frac{u^{(3)}}{\|u^{(3)}\|} = \rho_{33}a^{(3)} + \rho_{32}a^{(2)} + \rho_{31}a^{(1)}. \tag{43}$$



Метод Грама-Шмидта. Случай \mathbb{R}^3

$$(39), (41), (43) \Rightarrow$$

$$\underbrace{[q^{(1)}q^{(2)}q^{(3)}]}_{Q} = \underbrace{[a^{(1)}a^{(2)}a^{(3)}]}_{A} \underbrace{\begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{21} & \rho_{31} \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{32} \\ 0 & 0 & \rho_{33} \end{pmatrix}}_{R^{-1}} \tag{44}$$

Тогда решение х можно найти так

$$Ax = b \Leftrightarrow QRx = b \Leftrightarrow Rx = Q^{\top}b \Leftrightarrow x = R^{-1}Q^{\top}b. \tag{45}$$



Метод Грама-Шмидта. Случай \mathbb{R}^n

Пусть векторы $q^{(1)}, \dots, q^{(i-1)}$ ортонормированного базиса уже построены

$$(q^{(j)}, q^{(k)}) = \delta_{jk}, q^{(j)} = \sum_{i=1}^{j} \rho_{jk} a^{(k)}, j, k < i.$$
(46)

Построим і-ый базисный вектор

$$u^{(i)} = a^{(i)} - \sum_{j=1}^{i-1} proj_{q^{(j)}} a^{(i)} = a^{(i)} - \sum_{j=1}^{i-1} (a^{(i)}, q^{(j)}) q^{(j)} = a^{(i)} - \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} q^{(j)}.$$
 (47)

Тогда

$$q^{(i)} = \frac{u^{(i)}}{\|u^{(i)}\|} = \underbrace{\frac{1}{\|u^{(i)}\|}}_{= 2} a^{(i)} - \rho_{ii} \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \left(\sum_{k=1}^{j} \rho_{jk} a^{(k)} \right) = \rho_{ii} a^{(i)} + \sum_{k=1}^{i-1} \underbrace{\left(-\rho_{ii} \sum_{j=k}^{i-1} \gamma_{ij} \rho_{jk} \right)}_{= i} a^{(k)}.$$

Метод Грама-Шмидта. Случай \mathbb{R}^n

і-ый базисный вектор

$$q^{(i)} = \sum_{k=1}^{i} \rho_{ik} a^{(k)}, \rho_{ik} = -\rho_{ii} \sum_{j=k}^{i-1} \gamma_{ij} \rho_{jk}, k < i.$$
 (49)

Проверим, что $q^{(i)}$ ортогонален $q^{(k)}, k < i$

$$(q^{(i)}, q^{(k)}) = \rho_{ii} \left(u^{(i)}, q^{(k)} \right) = \rho_{ii} (a^{(i)} - \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} q^{(j)}, q^{(k)}) = \rho_{ii} \left(\gamma_{ik} - \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} (q^{(j)}, q^{(k)}) \right).$$

Метод Грама-Шмидта. Случай \mathbb{R}^n

Пусть Q - матрица, составленная из векторов ортонормированного базиса

$$Q = [q^{(1)}q^{(2)}\dots q^{(n)}]. \tag{50}$$

За матрицу R^{-1} обозначим матрицу, составленную из ρ_{ij}

$$R^{-1} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & \rho_{21} & \dots & \rho_{n1} \\ 0 & \rho_{22} & \dots & \rho_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \rho_{nn} \end{pmatrix}$$
 (51)

Из (46) следует, что $Q = AR^{-1}$. Учитывая (34), получаем решение

$$x = R^{-1}Q^{\top}b = R^{-1}(AR^{-1})^{\top}b.$$
 (52)

Метод Грама-Шмидта. Плохая численная устойчивость

Возьмем матрицу Гильберта размерности 10×10 и построим ортонормированный базис по алгоритму Грама-Шмидта.

```
>> eve(n) - 0*0'
ans =
   -0.0000
             0.0001
                       -0.0005
                                  0.0013
                                           -0.0006
                                                     -0.0010
                                                               -0.0000
                                                                          0.0010
                                                                                    0.0008
                                                                                             -0.0010
   0.0001
             -0.0024
                      0.0182
                                 -0.0440
                                            0.0189
                                                      0.0375
                                                                0.0014
                                                                         -0.0352
                                                                                   -0.0299
                                                                                              0.0356
   -0.0005
            0.0182
                       -0.1365
                                  0.3250
                                           -0.1251
                                                     -0.2962
                                                               -0.0184
                                                                         0.2734
                                                                                   0.2361
                                                                                             -0.2773
   0.0013
            -0.0440
                      0.3250
                                 -0.7470
                                            0.1967
                                                      0.8094
                                                                0.0775
                                                                         -0.7084
                                                                                   -0.6218
                                                                                              0.7148
   -0.0006
            0.0189
                       -0.1251
                                  0.1967
                                            0.2740
                                                     -0.7087
                                                               -0.0672
                                                                          0.4516
                                                                                    0.3842
                                                                                             -0.4256
   -0.0010
            0.0375
                       -0.2962
                                  0.8094
                                           -0.7087
                                                     -0.0124
                                                               -0.2682
                                                                         0.4703
                                                                                   0.4820
                                                                                             -0.5150
                                  0.0775
                                                                0.6253
                                                                         -0.3346
   -0.0000
            0.0014
                       -0.0184
                                           -0.0672
                                                     -0.2682
                                                                                   -0.1538
                                                                                              0.1383
   0.0010
             -0.0352
                      0.2734
                                 -0.7084
                                           0.4516
                                                      0.4703
                                                               -0.3346
                                                                         0.0517
                                                                                   -0.7245
                                                                                              0.5571
   0.0008
             -0.0299
                        0.2361
                                 -0.6218
                                            0.3842
                                                      0.4820
                                                               -0.1538
                                                                         -0.7245
                                                                                    0.3027
                                                                                              0.1260
   -0.0010
             0.0356
                       -0.2773
                                  0.7148
                                           -0.4256
                                                     -0.5150
                                                               0.1383
                                                                          0.5571
                                                                                    0.1260
                                                                                             -0.3554
```

$$\max_{ij} |I - Q^{\top}Q| = 0.8.$$

Модифицированный метод Грама-Шмидта

Вместо (47) последовательно вычислять

$$a_{1}^{(i)} = a^{(i)} - proj_{q^{(1)}}a^{(i)}$$

$$a_{2}^{(i)} = a_{1}^{(i)} - proj_{q^{(2)}}a_{1}^{(i)}$$

$$\vdots$$

$$a_{i-1}^{(i)} = a_{i-2}^{(i)} - proj_{q^{(i-1)}}a_{i-2}^{(i)}$$
(53)

Причем $a_{i-1}^{(i)}$ и есть $u^{(i)}$ (проверить самостоятельно).

Для матрицы Гильбера размерности 10 × 10: $\max_{ij} |I - Q^\top Q| \approx 7 \cdot 10^{-5}$.



Матрица вращения

Матрица вращения

$$T_{ij}(\phi) = \begin{pmatrix} i & j & \\ 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c & \dots & -s & \vdots \\ \vdots & \vdots & 1 & \vdots & \vdots \\ \vdots & s & \dots & c & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} j$$
(54)

где
$$c = \cos(\phi)$$
, $s = \sin(\phi)$.

 $T_{ij}x$ - вращение вектора x в плоскости Ox_ix_j на угол ϕ .

 $T_{ij}T_{ij}^{ op}=E\Rightarrow T_{ij}$ - ортогональная матрица.

Матрица вращения. Свойства

1. Умножение матрицы вращения на вектор меняют только 2 его компоненты

$$y_{i} = cx_{i} - sx_{j}$$

$$y = T_{ij}x, \quad y_{j} = sx_{i} + cx_{j}$$

$$y_{k} = x_{k}, k \neq i, j.$$

$$(55)$$

При этом $||x||_2 = ||y||_2$.

- 2. Аналогичное утверждение справедливо и для умножения строки на матрицу вращения, т.к. $y^{\top} = x^{\top} T_{ij}$.
- 3. $x \in \mathbb{R}^n$, $x \neq 0$. Существует последовательность матриц вращения, которая преобразует вектор x в вектор естественного базиса

$$(T_{1n} \dots T_{13} T_{12}) x = \alpha \cdot e^{(1)}.$$
 (56)



Матрица вращения. Свойства

Выберем ϕ так, чтобы $y_j = 0$

$$sin(\phi)x_i + cos(\phi)x_j = 0 \Rightarrow tg(\phi) = -\frac{x_j}{x_i}.$$
 (57)

$$x = x^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, x^{(1)} = T_{12}x^{(0)} = \begin{pmatrix} x_1^{(1)} \\ 0 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, x^{(2)} = T_{13}x^{(1)} = \begin{pmatrix} x_1^{(2)} \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$
(58)

$$T_1 = T_{1n} \dots T_{13} T_{12}$$
 и $T_1 x = \alpha e^{(1)}$.

Упражнение

Пусть $x = (0, 1, \sqrt{3})^{\top}$. Построить последовательность матриц вращений, которая преобразовывает x в вектор пропорциональный $e^{(1)} = (1, 0, 0)^{\top}$.



Пусть c_{12} и s_{12} - некоторые отличные от 0 числа.

Новое 1-е уравнение - линейная комбинация 1-го и 2-го уравнений с коэффициентами c_{12} и s_{12} .

Новое 2-е уравнение - линейная комбинация 1-го и 2-го уравнений с коэффициентами $-s_{12}$ и c_{12} .

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

$$(59)$$

Условия на c_{12} и s_{12}

$$(-s_{12}a_{11} + c_{12}a_{21}) = 0, c_{12}^2 + s_{12}^2 = 1.$$
(60)

Тогда

$$c_{12} = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}, s_{12} = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}}.$$
 (61)

Данное преобразование эквивалентно умножению A и b на T_{12} слева

$$T_{12} = \begin{pmatrix} c_{12} & s_{12} & 0 & \dots & 0 \\ -s_{12} & c_{12} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$
 (62)

 T_{12} - матрица вращения в плоскости Ox_1x_2 на угол ϕ_{12} такой, что $\cos(\phi_{12})=c_{12}$, $\sin(\phi_{12})=s_{12}$.

Исключим x_1 из 3-го уравнения с помощью c_{13} и s_{13}

$$c_{13} = \frac{a_{11}^{(1)}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(1)}\right)^2 + a_{31}^2}}, s_{13} = \frac{a_{31}}{\sqrt{\left(a_{11}^{(1)}\right)^2 + a_{31}^2}}.$$
 (63)

Это эквивалентно умножениею СЛАУ слева на T_{13}

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

$$(64)$$

После n-1 таких преобразований

$$a_{11}^{(n-1)}x_1 + a_{12}^{(n-1)}x_2 + \dots + a_{1n}^{(n-1)}x_n = b_1^{(n-1)}$$

$$a_{22}^{(1)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(1)}x_n = b_2^{(1)}$$

$$\dots \dots \dots \dots \dots$$

$$a_{n2}^{(1)}x_2 + \dots + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)}$$
(65)

В матричной записи

$$A^{(1)}x = b^{(1)}, (66)$$

где
$$A^{(1)} = T_{1n} \dots T_{13} T_{12} A, b^{(1)} = T_{1n} \dots T_{13} T_{12} b.$$

Второй шаг метода вращений - исключение x_2 из всех уравнений, начиная с 3-го. В результате выполнения n-2 подшагов СЛАУ преобразуется к виду

В матричной форме

$$A^{(2)}x = b^{(2)}, (68)$$

где
$$A^{(2)} = T_{2n} \dots T_{24} T_{23} A^{(1)}, b^{(2)} = T_{2n} \dots T_{24} T_{23} b^{(1)}.$$



После завершения n-1 шага система имеет вид

В матричной записи

$$A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}, (70)$$

где
$$A^{(n-1)} = T_{n-1,n}A^{(n-2)}, b^{(n-1)} = T_{n-1,n}b^{(n-2)}.$$



Матрица системы $A^{(n-1)}$ - верхняя треугольная, причем

$$A^{(n-1)} = TA, (71)$$

где $T = T_{n-1,n} \dots T_{2n} \dots T_{23} T_{1n} \dots T_{12}$ - матрица результирующего вращения.

Матрица T ортогональна как произведение ортогональных матриц. Обозначим $Q = T^{-1} = T^{\top} \Rightarrow$ получили QR-разложение матрицы A.

Обратный ход метода вращений проводится точно так же, как и для метода Гаусса.

Метод вращений. Замечания

© Длина любого вектора-столбца расширенной матрицы системы остается такой же, как у соответствующего столбца исходной системы

$$\left(a_{1j}^{(1)}\right)^2 + \left(a_{2j}^{(1)}\right)^2 = a_{1j}^2 + a_{2j}^2. \tag{72}$$

- \Rightarrow не будет наблюдаться роста элементов \Rightarrow метод вращений обладает хорошей обусловленностью.
- 😊 Вычислительные затраты выше чем у метода Гаусса.

Упражнение

Доказать равенство (72).

Матрица отражения

Нормаль w задает гиперплоскость.

y - отражение вектора x относительно гиперплоскости

$$y = Px, (73)$$

где P - матрица отражения.

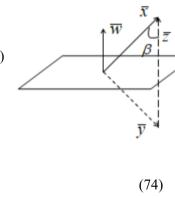
$$y = x - z$$

$$z = ||z|| \frac{w}{||w||}, ||z|| = 2\cos(\beta) ||x|| = 2\frac{w^{\top}x}{||w|||x||} ||x|| = 2\frac{w^{\top}x}{||w||}$$

$$y = x - \frac{2}{||w||^2} ww^{\top}x = \left(E - \frac{2}{||w||^2} ww^{\top}\right)x$$

$$P = E - \frac{2}{||w||^2} ww^{\top} = E - 2uu^{\top},$$

где $u = \frac{w}{\|w\|}$.



Свойства матриц отражения

- 1. $P = P^{\top}$ $p_{ij} = \ldots = p_{ji}.$
- 2. $P^{-1} = P = P^{\top}$ $PP = (E - 2uu^{\top})(E - 2uu^{\top}) = \dots = E.$
- 3. Если $x \neq y$ и $||x|| = ||y|| \neq 0$, то $\exists P : y = Px$. В качестве w нужно взять x y.

Следствие

Любой вектор $x \neq \mathbf{0}$ с помощью матрицы отражения может быть преобразован в вектор пропорциональный первому вектору естественного базиса

$$Px = \alpha e^{(1)}, e^{(1)} = (1, 0, \dots, 0)^{\top}.$$
 (75)



Свойства матриц отражения

Зададим α следующим образом

$$\alpha = \begin{cases} -sign(x_1) \|x\|, & x_1 \neq 0 \\ \pm \|x\|, & x_1 = 0. \end{cases}$$
 (76)

Тогда $y=(\alpha,0,\ldots,0)^{\top}\Rightarrow w=(x_1-\alpha,x_2,\ldots,x_n)$ и

$$P = E - \underbrace{\frac{2}{\|\mathbf{w}\|^2}}_{\beta} \mathbf{w} \mathbf{w}^{\mathsf{T}},\tag{77}$$

где
$$\frac{1}{\beta} = \frac{\|\mathbf{w}\|^2}{2} = \frac{1}{2}(x - y, x - y) = \frac{1}{2}\left(\|\mathbf{x}\|^2 + \|\mathbf{y}\|^2 - 2(x, y)\right) = \|\mathbf{x}\|^2 + |\mathbf{x}_1|\|\mathbf{x}\|.$$

Матрица отражения

Упражнение

Пусть $x=(2,-1,2)^{\top}$. Построить матрицу отражения, преобразующую x в вектор пропорциональный $e^{(1)}=(1,0,0)^{\top}$.

Замечание

При умножении матрицы отражения P на матрицу A можно сократить трудоемкость вычисления результата. Вместо $\sim n^3$ арифметических операций, можно получить за $\sim n^2$

$$PA = A - \beta(w(w^{\top}A)). \tag{78}$$

Умножение матрицы отражения P на вектор x можно реализовать за $\sim n$ операций вместо n^2

$$Px = x - \beta(x, w)w. \tag{79}$$



Метод отражений

 $A=A^{(n)}=(a_{(1)}^{(n)},\ldots,a_{(n)}^{(n)})$ - представление матрицы по столбцам: верхний индекс – размерность, нижний – номер столбца.

Построим P_1 : $P_1 a_{(1)}^{(n)} = r_{11} e_{(1)}^{(n)}$. Тогда

$$P_1 A = A_1 = \begin{bmatrix} \frac{R^{(1)}}{0} & \frac{B^{(1,n-1)}}{A^{(\bar{n}-1)}} \end{bmatrix}$$
 (80)

$$A^{(n-1)}=(a_{(1)}^{(n-1)},\ldots,a_{(n-1)}^{(n-1)}).$$
 Построим $P_2^{(n-1)}\colon P_2^{(n-1)}a_{(1)}^{(n-1)}=r_{22}e_{(1)}^{(n-1)}$ и

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & P_2^{(n-1)} \end{bmatrix} \tag{81}$$

Тогда

$$P_2 A_1 = A_2 = \begin{bmatrix} R^{(2)} & B^{(2,n-2)} \\ & A^{(n-2)} \end{bmatrix}$$
 (82)



Метод отражений

$$A_k = \begin{bmatrix} R^{(k)} & B^{(1,n-k)} \\ \mathbf{0} & A^{(n-k)} \end{bmatrix}$$
 (83)

 $A^{(n-k)}=(a_{(1)}^{(n-k)},\ldots,a_{(n-k)}^{(n-k)})$. Построим $P_{k+1}^{(n-k)}$: $P_{k+1}^{(n-k)}a_{(1)}^{(n-k)}=r_{k+1,k+1}e_{(1)}^{(n-k)}$ и

$$P_{k+1} = \begin{bmatrix} E^{(k)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & P_{k+1}^{(n-k)} \end{bmatrix}$$

$$\tag{84}$$

Тогда

$$P_{k+1}A_k = A_{k+1} = \begin{bmatrix} R^{(k+1)} & B^{(k+1,n-k-1)} \\ & A^{(n-k-1)} \end{bmatrix}$$
 (85)

$$P_1\cdot (A|b)=(A_1|b^{(1)}) o P_2\cdot (A_1|b^{(1)})=(A_2|b^{(2)}) o \dots P_{n-1}\cdot (A_{n-2}|b^{(n-2)})=(R|f)$$
 Свели исходную задачу к $Rx=f$.

Метод ортогонализации

Пусть $x=(x_1,\dots,x_n)^{\top}$ - точное решение задачи Ax=b. Введем обозначения

$$Y = (x_1, \dots, x_n, 1) \in \mathbb{R}^{n+1}$$

$$A_i = (a_{i1}, \dots, a_{in}, -b_i) \in \mathbb{R}^{n+1}, i = 1, \dots, n.$$
(86)

Тогда СЛАУ может быть переписана в виде *п* условий ортогональности

$$(Y, A_i) = 0, i = 1, \dots, n.$$
 (87)

Решить СЛАУ = найти вектор Y ортогональный всем векторам A_i .

Метод ортогонализации

Будем строить последовательность подпространств $\mathbb{R}^{n+1} = E^{(0)} \supset E^{(1)} \supset \ldots \supset E^{(n)}$: векторы из $E^{(k)}$ ортогональны A_1, \ldots, A_k .

Для $E^{(0)}$ возьмем стандартный ортонормированный базис $e_i^{(0)}=(0,\dots,1,\dots,0)^{\top}.$ Базис подпространства $E^{(k)}$

$$e_{i}^{(k)} = e_{i}^{(k-1)} - \frac{(A_{k}, e_{i}^{(k-1)})}{(A_{k}, e_{k}^{(k-1)})} e_{k}^{(k-1)}, i = k+1, \dots, n.$$

$$e_{1}^{(0)} e_{2}^{(0)} e_{3}^{(0)} \dots e_{n}^{(0)} e_{n+1}^{(0)} E^{(0)}$$

$$e_{2}^{(1)} e_{3}^{(1)} \dots e_{n}^{(1)} e_{n+1}^{(1)} E^{(1)} A_{1}$$

$$e_{2}^{(2)} \dots e_{n}^{(2)} e_{n+1}^{(2)} E^{(2)} A_{1}, A_{2}$$

$$\dots \dots \dots$$

$$e_{n}^{(n-1)} e_{n+1}^{(n-1)} E^{(n-1)} A_{1}, A_{2}, \dots, A_{n-1}$$

$$e_{n+1}^{(n)} E^{(n)} A_{1}, A_{2}, \dots, A_{n-1}, A_{n}$$

$$(88)$$

Метод ортогонализации

Проверим, что векторы из $E^{(k)}$ ортогональны A_1, \ldots, A_k :

- 1. базис $E^{(k)}$ линейная комбинация базиса $E^{(k-1)} \Rightarrow$ векторы из $E^{(k)}$ ортогональны A_1, \dots, A_{k-1} .
- 2. $(A_k, e_i^{(k)}) = (A_k, e_i^{(k-1)}) \frac{(A_k, e_i^{(k-1)})}{(A_k, e_k^{(k-1)})} (A_k, e_k^{(k-1)}) = 0, i = k+1, \ldots, n.$

Лемма (доказать самостоятельно)

Вектор $e_i^{(k)}$ имеет не более k+1 отличных от 0 компонент. Отличными от 0 могут быть компоненты с номерами $1,\ldots,k$ и i.

Следствие

Вектор $e_i^{(k)}$ получается из $e_i^{(k-1)}$ изменением компонент $1,\dots,k$, т.к. остальные компоненты у вектора $e_k^{(k-1)}$ нулевые \Rightarrow у всех $e_{n+1}^{(k)}$ (n+1)-я компонента равна 1 $\Rightarrow e_{n+1}^{(n)}$ - искомое решение.

