

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ
БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ»

В. В. Корзунина,
З.А. Шабунина

**ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ
ПО ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДАМ**

ЧАСТЬ 1. ТЕОРИЯ

Учебное пособие

Издательско-полиграфический центр
Воронежского государственного университета
2011

Утверждено научно-методическим советом факультета прикладной математики, информатики и механики 25 марта 2011 г., протокол № 7

Рецензент канд. физ.-мат. наук, доц. кафедры уравнений в частных производных и теории вероятности И.В. Михайлова

Учебное пособие подготовлено на кафедре вычислительной математики и прикладных информационных технологий факультета ПММ Воронежского государственного университета.

Учебное пособие рекомендуется для студентов 2 и 3 курсов факультета ПММ.

Для специальностей: 010501 – Прикладная математика и информатика, 010901 – Механика

Содержание

1. Решение систем линейных алгебраических уравнений	4
1.1. Метод Халецкого решения систем линейных уравнений.....	4
1.1.1. Метод Халецкого для систем линейных алгебраических уравнений в общем случае	4
1.1.2. Метод Халецкого для систем линейных алгебраических уравнений с симметричными матрицами	6
1.1.3. Метод Халецкого для решения систем линейных уравнений с ленточными матрицами	7
1.1.4. Хранение ленточных матриц в прямоугольных массивах	10
1.1.5. Расчетные формулы метода Халецкого при хранении ленточных матриц в прямоугольных массивах	11
1.2. Метод Гаусса	12
1.2.1. Схема единственного деления. О реализации полной и частичной стратегий выбора ведущего элемента.....	12
1.2.2. Метод Гаусса с частичной стратегией выбора ведущих элементов по столбцу	14
1.2.3. Метод Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов	15
1.2.4. Вычисление обратной матрицы с использованием метода Гаусса.....	16
1.2.5. Определение ранга матрицы	17
1.3. Метод квадратных корней	18
1.3.1. Системы с симметричными матрицами	18
1.3.2. Метод квадратных корней для систем линейных уравнений с ленточными матрицами	20
1.3.3. Расчетные формулы метода квадратных корней при хранении ленточных матриц в прямоугольных массивах	21
1.4. Методы, основанные на QR разложении матриц	22
1.4.1. Метод отражений (метод Хаусхолдера)	22
1.4.2. Метод вращений (метод Гивенса)	24
2. Методы решения задач на собственные значения $Ax = \lambda x$	26
2.1. Степенной метод (метод прямых итераций)	26
2.2. Метод исчерпывания.....	27
2.3. Метод обратных итераций.....	28
2.4. Метод обратных итераций с исчерпыванием	28
2.5. Обобщенная задача на собственные значения	29
2.6. Метод вращений Якоби	29
3. Переопределенные системы линейных уравнений.....	32
4. О решении систем линейных уравнений в комплексной области.....	33
Литература	35

1. Решение систем линейных алгебраических уравнений

1.1. Метод Халецкого решения систем линейных уравнений

1.1.1. Метод Халецкого для систем линейных алгебраических уравнений в общем случае

Если все главные миноры матрицы A отличны от нуля, то матрица A , согласно известной LU-теореме линейной алгебры [1], представима в виде произведения двух матриц

$$A = BC, \quad (1.1.1)$$

где B – нижняя треугольная матрица, C – верхняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали. Соотношение (1.1.1) символически обозначено на рис. 1.1.1.

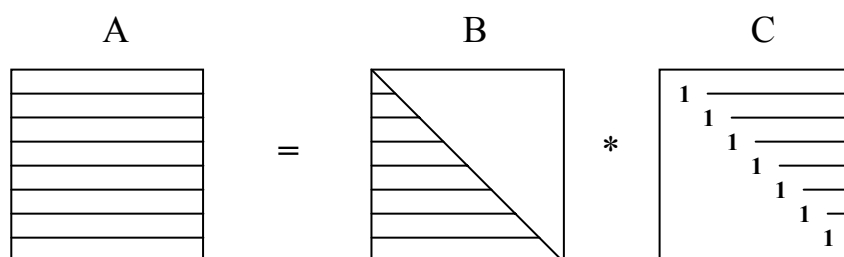


Рис. 1.1.1

Нетрудно видеть, что справедливы формулы:

$$b_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} c_{kj}, \quad j = 1 \div N, \quad i = j \div N, \quad (1.1.2)$$

$$c_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} c_{kj} \right) / b_{ii}, \quad i = 1 \div N, \quad j = i + 1 \div N. \quad (1.1.3)$$

В самом деле, соотношения (1.1.2), (1.1.3) непосредственно следуют из правила перемножения двух матриц

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n b_{ik} c_{kj}, \quad (1.1.4)$$

а верхние пределы в знаках сумм отражают тот факт, что матрицы B и C треугольные.

Для того, чтобы по формулам (1.1.2), (1.1.3) вычислять элементы матриц B и C , необходимо указать такой порядок определения этих элементов, чтобы к моменту вычисления очередных b_{ij} или c_{ij} все значения, стоя-

щие в правых частях формул (1.1.2), (1.1.3), были известны. Для вычисления b_{ij} , ($i \geq j$) необходимо знать (см. рис. 1.1. 2):

- элементы нижней треугольной матрицы B , стоящие в i -ой строке с первого по $(j-1)$ -й столбец;
- элементы верхней треугольной матрицы C , стоящие в j -ом столбце, начиная с первого по $(j-1)$ -й включительно.

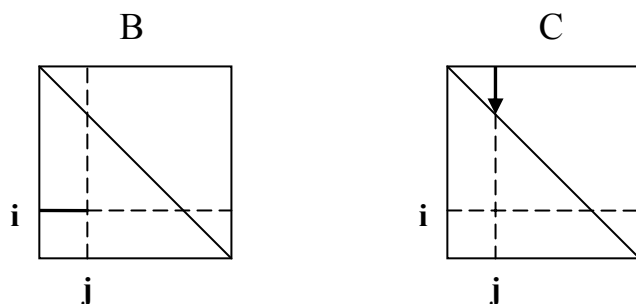


Рис. 1.1.2

Сумма в правой части формулы (2) – это сумма произведений одноименных элементов i -й строки матрицы B и j -ого столбца матрицы C с первого по $(j-1)$ -й включительно.

Для вычисления элемента c_{ij} , ($i < j$) нужно знать (рис. 1.1.3):

- все элементы нижней треугольной матрицы B , стоящие в i -ой строке;
- элементы верхней треугольной матрицы C , стоящие в j -ом столбце с первой по $(i-1)$ -ую строки.

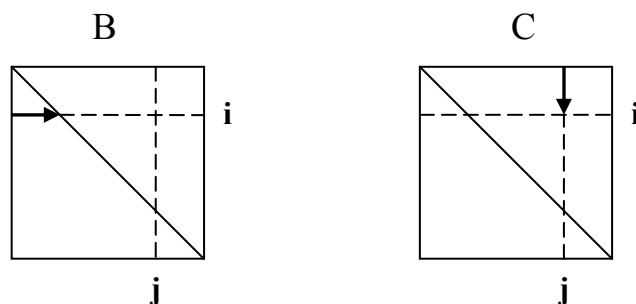


Рис. 1.1.3

Сумма в правой части формулы (1.1.3) – это сумма произведений одноименных элементов i -ой строки матрицы B и j -ого столбца матрицы C , начиная с первых и кончая $(i-1)$ -ыми элементами.

Укажем одну из возможных последовательностей вычисления элементов матриц B , C :

для j от 1 до N

нц

вычисление j -ого столбца матрицы B ;

вычисление j -ой строки матрицы C

кц.

Под вычислением j -ого столбца матрицы B здесь понимается последовательное вычисление элементов b_{kj} , $k = j \div N$, под вычислением j -ой строки матрицы C – последовательное вычисление элементов c_{jk} , $k = (j + 1) \div N$. Если матрица A представлена в виде (1.1.1), то решение системы линейных алгебраических уравнений

$$Ax = f \quad (1.1.5)$$

сводится к последовательному решению двух систем уравнений с треугольными матрицами

$$By = f, \quad (1.1.6)$$

$$Cx = y, \quad (1.1.7)$$

которые в символическом виде изображены на рис. 1.1.4.

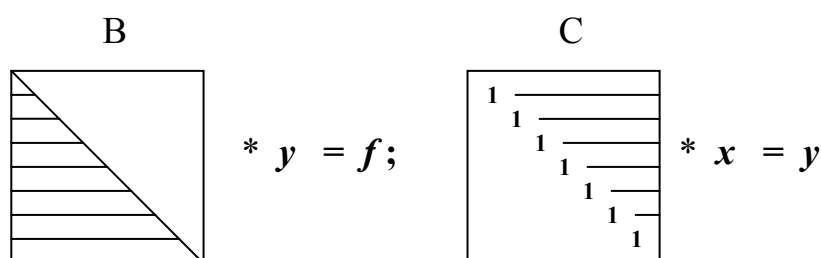


Рис. 1.1.4

Компоненты векторов x и y определяются по формулам

$$y_i = \left(f_i - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik} y_k \right) / b_{ii}, \quad i = 1 \div N, \quad (1.1.8)$$

$$x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^N c_{ik} x_k, \quad i = N \div 1. \quad (1.1.9)$$

Вычисление элементов матриц B , C по формулам (1.1.2), (1.1.3) называется **прямым ходом метода Халецкого**, а определение y , x по формулам (1.1.8), (1.1.9) – **обратным ходом метода Халецкого**.

1.1.2. Метод Халецкого для систем линейных алгебраических уравнений с симметричными матрицами

Если матрица A симметрична, то метод Халецкого существенно упрощается [2]. В этом случае элементы матрицы C выражаются через элементы матрицы B

$$c_{ij} = \frac{b_{ji}}{b_{ii}}, \quad (1.1.10)$$

и матрицу C вычислять нет необходимости. В самом деле, соотношение (1.1.10) непосредственно следует из сопоставления формул (1.1.2), (1.1.3). Матрица B , как и в общем случае, определяется по столбцам: сначала 1-й столбец, затем 2-й и т. д. С учетом соотношения (1.1.10) формула для вычисления элементов b_{ij} записывается в виде:

$$b_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} b_{jk} / b_{kk}, \quad i = 1 \div N, j = i \div N. \quad (1.1.11)$$

Расчетная формула (1.9) с учетом (1.10) принимает вид

$$x_i = y_i - \left(\sum_{k=i+1}^N b_{ki} x_k \right) / b_{ii}, \quad i = N \div 1. \quad (1.1.12)$$

1.1.3. Метод Халецкого для решения систем линейных уравнений с ленточными матрицами

Рассмотрим решение линейной системы уравнений $Ax = f$, где A – ленточная матрица. Ленточная матрица – это матрица, у которой индексы i, j отличных от нуля элементов $a_{ij} \neq 0$ удовлетворяют неравенству $|j - i| \leq L$. Иными словами, ленточная матрица – это матрица, у которой отличные от нуля элементы принадлежат главной диагонали, $(L - 1)$ кодиагонали под главной диагональю и $(L - 1)$ кодиагонали над главной диагональю. L называют половиной ширины ленты, полная ширина ленты равна $(2L - 1)$. Символически ленточная матрица изображена на рис. 1.1.5.

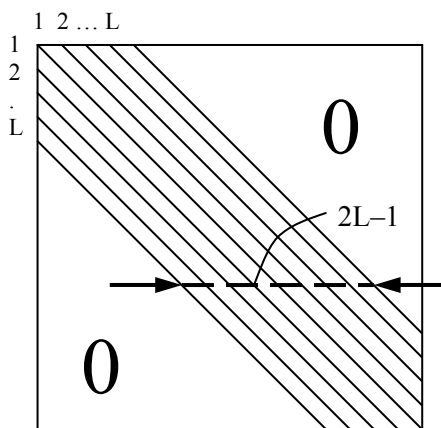


Рис. 1.1.5

Треугольные матрицы тоже бывают ленточными. Нижняя треугольная матрица – это матрица, у которой отличные от нуля элементы расположены на главной диагонали и $(L - 1)$ кодиагоналях под главной диагональю. У верхней треугольной матрицы отличные от нуля элементы располагаются на главной диагонали и $(L - 1)$ диагоналях над ней. У ленточных матриц

ширина ленты равна L . Если ленточная матрица с шириной ленты $(2L - 1)$ удовлетворяет условию LU-теоремы, то она представима в виде произведения нижней ленточной треугольной матрицы B с шириной ленты L на верхнюю ленточную треугольную матрицу C с единицами на главной диагонали и шириной ленты L (рис. 1.1.6).

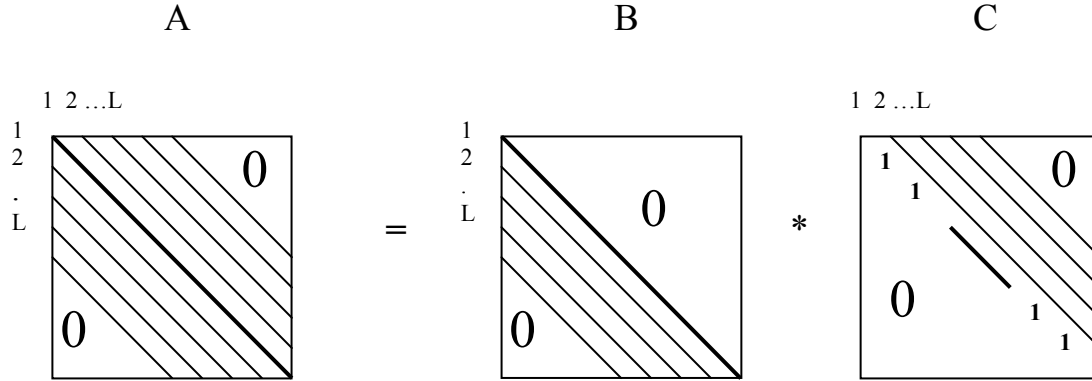


Рис. 1.1.6

Пусть (i, i) – индексы диагонального элемента ленточной матрицы, для которого $L \leq i \leq N - L$. Для этого элемента на рис. 1.1.7 представлены номера первых и последних в i -ой строке и i -ом столбце элементов, принадлежащих ленте матрицы.

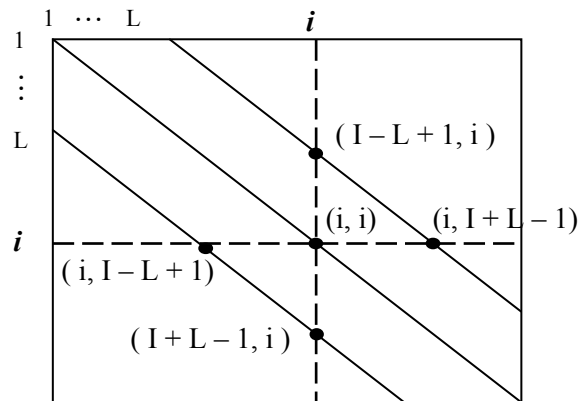


Рис. 1.1.7

В общем случае, если i – номер строки, то в этой строке первый элемент ленты стоит в столбце i_0 , последний – в столбце i_N , причем

$$\begin{aligned}
 i_0 &= \begin{cases} 1, & \text{если } i \leq L, \\ i - L + 1, & \text{если } i > L, \end{cases} \\
 i_N &= \begin{cases} i + L - 1, & \text{если } i \leq N - L, \\ N, & \text{если } i > N - L. \end{cases}
 \end{aligned} \quad (1.1.13)$$

Аналогично, первый и последний элементы ленты в j -ом столбце имеют номера строк j_0 , j_N соответственно:

$$\begin{aligned}
j0 &= \begin{cases} 1, & \text{если } j \leq L \\ j - L + 1, & \text{если } j > L, \end{cases} \\
jN &= \begin{cases} j + L - 1, & j \leq N - L \\ N, & i > N - L. \end{cases}
\end{aligned} \tag{1.1.14}$$

В дальнейшем будет удобно пользоваться двумя целочисленными функциями $K0(i)$, $KN(i)$:

$$\begin{aligned}
K0(i) &= \begin{cases} 1, & \text{если } i \leq L, \\ i - L + 1, & \text{если } i > L. \end{cases} \\
KN(i) &= \begin{cases} i + L - 1, & i \leq N - L, \\ N, & i > N - L. \end{cases}
\end{aligned} \tag{1.1.15}$$

В формуле (1.1.2) для вычисления элемента $b_{ij} (i \geq j)$ присутствует сумма $\sum_{k=1}^{j-1} b_{ik} c_{kj}$. Если матрица системы A ленточная, то отличные от нуля элементы i -ой строки матрицы B начинаются с номера $K0(i)$, а отличные от нуля элементы j -ого столбца матрицы C – с номера $K0(j)$ (см. рис. 1.1.7). Для исключения из рассматриваемой суммы заведомо нулевых слагаемых нижний предел суммирования с учетом того, что $i \geq j$, заменяется на $K0(i)$. Аналогичным образом изменяются пределы суммирования в формулах (1.1.3), (1.1.8), (1.1.9). Окончательно расчетные формулы метода Халецкого для систем с ленточными матрицами принимают вид

$$b_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=K0(i)}^{j-1} b_{ik} c_{kj}, \quad j = 1 \div N, \quad i = kN(j), \tag{1.1.16}$$

$$c_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=K0(j)}^{j-1} b_{ik} c_{kj} \right) / b_{ii}, \quad i = 1 \div N, \quad j = kN(i), \tag{1.1.17}$$

$$y_i = \left(f_i - \sum_{k=K0(i)}^{j-1} b_{ik} y_k \right) / b_{ii}, \quad i = 1 \div N, \tag{1.1.18}$$

$$x_i = y_i - \sum_{k=i+1}^{KN(i)} c_{ik} x_k, \quad i = N \div 1. \tag{1.1.19}$$

Если матрица системы A симметрична и ленточна, то в формуле (1.1.11) для вычисления элементов b_{ij} нижний предел суммы заменяется на $K0(i)$, а в формуле (1.12) для вычисления x_i верхний предел суммы заменяется на $KN(i)$.

1.1.4. Хранение ленточных матриц в прямоугольных массивах

Ниже мы будем полагать, что $L \ll N$. Тогда для хранения матриц A, B, C нецелесообразно пользоваться массивами размерности $N \times N$, лучше хранить только элементы лент этих матриц в массивах размерности $N \times (2N - 1)$, $N \times L$, которые будем называть прямоугольными. Рассмотрим сначала матрицу с полной лентой ширины $(2L - 1)$. Наиболее естественным является размещение ленты в прямоугольном массиве, символически представленное на рис. 1.1.8.

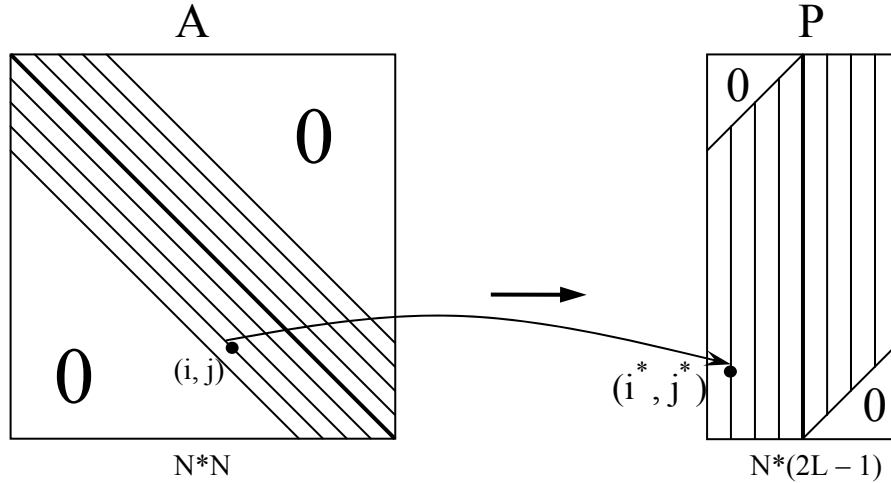


Рис. 1.1.8

Такое размещение предполагает, что каждая i -я строка ленты матрицы A хранится в i -ой строке матрицы P , самая нижняя кодиагональ ленты хранится в первом столбце, следующая кодиагональ – во втором столбце и т. д. Очевидно, что главная диагональ хранится в L -ом столбце, самая верхняя кодиагональ ленты – в $(2L - 1)$ -ом столбце.

Пусть (i, j) – индексы некоторого элемента матрицы A , (i^*, j^*) – индексы этого же элемента в прямоугольном массиве P :

$$a_{ij} \rightarrow P_{i^* j^*}. \quad (1.1.20)$$

Нетрудно видеть, что связь между индексами (i, j) и (i^*, j^*) определяется соотношениями

$$\begin{cases} i^* = i, \\ j^* = j - i + L. \end{cases} \quad (1.1.21)$$

В случае симметричной матрицы можно хранить только половину (нижнюю и верхнюю) ленты и использовать прямоугольные массивы размерности $N \times L$. Если хранится нижняя часть симметричной ленты, как символически изображено на рис. 1.1.9, то преобразование индексов (i, j) и (i^*, j^*) сохраняет вид (1.1.21).

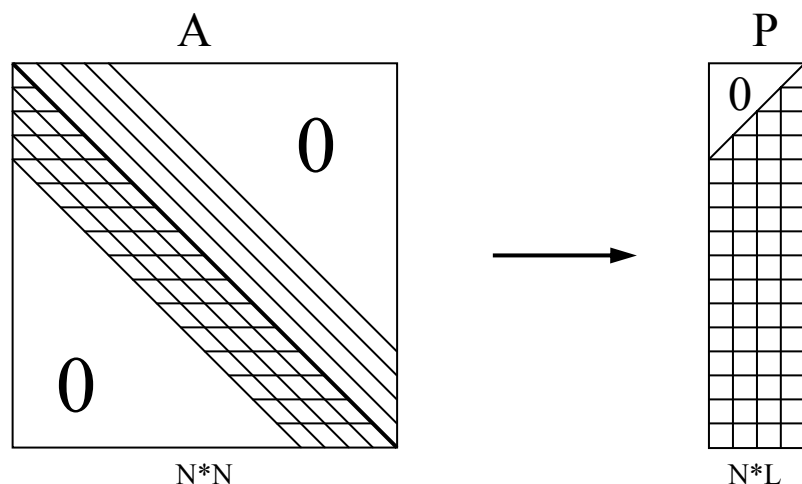


Рис. 1.1.9

Если хранится верхняя часть ленты (см. рис. 1.1.10), то преобразование индексов будет несколько иным:

$$\begin{cases} i^* = i, \\ j^* = j - i + 1. \end{cases} \quad (1.1.22)$$

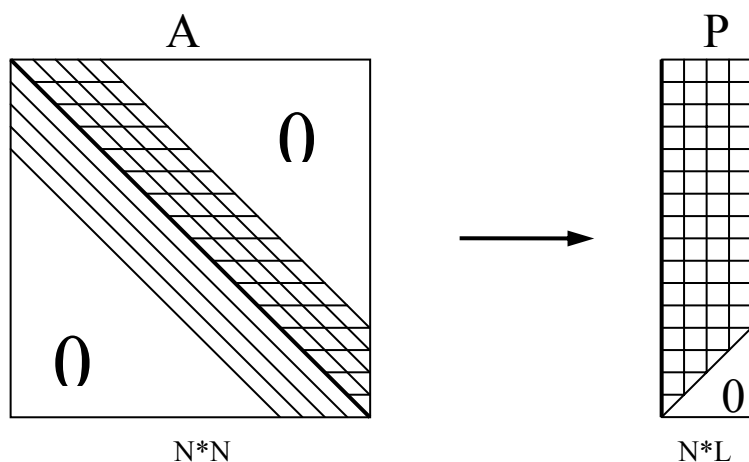


Рис. 1.1.10

1.1.5. Расчетные формулы метода Халецкого при хранении ленточных матриц в прямоугольных массивах

Пусть ленточная матрица коэффициентов линейной системы уравнений задана в виде прямоугольного массива P размерности $N \times (2N - 1)$. Нижнюю ленточную треугольную матрицу B и верхнюю ленточную треугольную матрицу C можно хранить в одном прямоугольном массиве Q размерности $N \times (2N - 1)$. В самом деле, в первых L столбцах матрицы Q будет размещена лента матрицы B , а в $(L - 1)$ последних столбцах – лента матрицы C , за исключением единичной главной диагонали, которую можно

не хранить. Тогда для элементов матриц B и C остаются в силе преобразования индексов (1.1.21). Расчетные формулы метода Халецкого получаются из формул (1.1.16) – (1.1.19) заменой

$$\begin{aligned} a_{ij} &\rightarrow P_i, j-i+L \\ b_{ij} &\rightarrow Q_i, j-i+L \\ c_{ij} &\rightarrow Q_i, j-i+L \end{aligned} \quad (1.1.23)$$

с сохранением пределов суммирования.

1.2. Метод Гаусса

1.2.1. Схема единственного деления. О реализации полной и частичной стратегий выбора ведущего элемента

Схемой единственного деления метода Гаусса называют алгоритм решения систем линейных уравнений

$$\tilde{A}x = b, \quad (1.2.1)$$

состоящий из двух частей – прямого хода и обратного хода.

Прямой ход – это приведение системы (1.2.1) к системе с верхней треугольной матрицей с единицами на главной диагонали. Обратный ход – непосредственное определение вектора неизвестных из полученной системы уравнений с треугольной матрицей.

Для удобства будем использовать расширенную матрицу A размерности $N \times (N + 1)$. В первых N столбцах матрицы A размещена матрица \tilde{A} системы (1.2.1), в последнем столбце – вектор правой части системы (1.2.1).

Символически прямой ход изображен на рис.1.2.1.

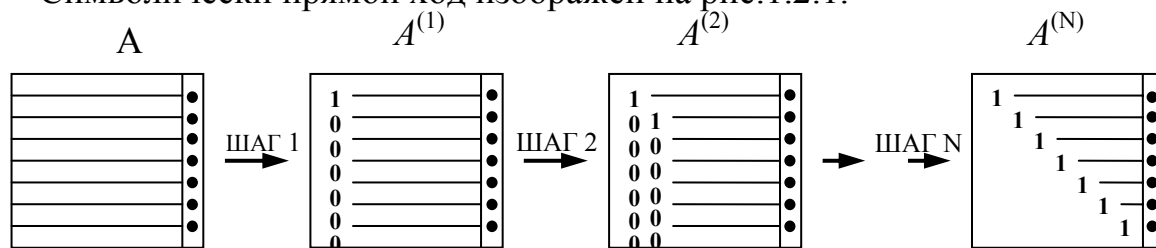


Рис. 1.2.1

Шаг 1 – это исключение x_1 с помощью 1-го уравнения из всех уравнений, начиная со 2-го.

Шаг 2 – это исключение x_2 с помощью 2-го уравнения из всех уравнений, начиная со 3-го.

На i -ом шаге прямого хода уравнения с 1-го по $(i-1)$ -ое не изменяются, i -е уравнение делится на $a_{ii}^{(i-1)}$, из уравнений с $(i+1)$ -ого по n -ое исключается неизвестное x_i .

Замечание. Пока мы предполагаем, что все операции деления корректны. Случаи, когда в знаменателе стоят нулевые значения, будут обсуждены позже.

Элемент матрицы A , стоящий множителем перед компонентой вектора x , которая подлежит исключению, в уравнении, с помощью которого будет исключаться эта компонента x из других уравнений, называется **ведущим элементом**.

В схеме единственный на i -ом шаге ведущий элемент равен $a_{ii}^{(i-1)}$. В предложении, что все ведущие элементы отличны от нуля, запишем псевдокод прямого хода, размещая все промежуточные матрицы $A^{(i)}$ на месте исходной матрицы A .

для i от 1 до N

нц

$R := 1/a_{ii}$; $A_{ii} := 1$;

для j от $i+1$ до $N+1$

нц

$a_{ij} := a_{ij} + R$

кц

для k от $i+1$ до N

(1.2.2)

нц

$R := a_{ki}$; $a_{ki} := 0$;

для j от $i+1$ до $N+1$

нц

$A_{kj} := A_{kj} - R * A_{ij}$

кц

кц

кц

Расчетные формулы обратного хода в схеме единственного деления представляются в виде

$$x_i = a_{i,n+1} - \sum_{k=i+1}^N a_{ik} x_k, \quad i = N \div 1. \quad (1.2.3)$$

1.2.2. Метод Гаусса с частичной стратегией выбора ведущих элементов по столбцу

В методе Гаусса с частичной стратегией выбора ведущих элементов по столбцу сохраняется порядок исключения неизвестных – сначала исключается x_1 , затем x_2 и т. д. Но меняются номера уравнений, с помощью которых исключаются неизвестные. На первом шаге из первого столбца матрицы A выбирается максимальный по модулю элемент, пусть это будет $a_{i_1,1}$ (ведущий элемент первого шага). Уравнение i_1 -ое делится на $a_{i_1,1}$ с тем, чтобы коэффициент при x_1 стал равным единице. Далее с помощью i_1 -ого уравнения из всех остальных уравнений исключается x_1 . Во всех дальнейших преобразованиях системы уравнений уравнение i_1 -ое меняться не будет. Если бы после выбора ведущего элемента $a_{i_1,1}$ поменять местами 1-ое и i_1 -ое уравнения, то матрица $A^{(1)}$ после первого шага имела бы такой же вид (см. рис. 1.2.1), что и в схеме единственного деления.

На втором шаге среди элементов второго столбца за исключением элемента $a_{i_1,2}^{(1)}$ ищется максимальный по модулю элемент. Пусть это будет элемент $a_{i_2,2}^{(1)}$ (ведущий элемент второго шага). Затем уравнение i_2 делится на коэффициент $a_{i_2,2}^{(1)}$, и с помощью этого уравнения из всех остальных, кроме i_1 -ого уравнения, исключается неизвестное x_2 . Если бы после выбора ведущего элемента $a_{i_2,2}^{(1)}$ поменять местами 2-ое и i_2 -ое уравнения, то матрица $A^{(2)}$ после второго шага имела бы вид, как на рис. 1.2.1.

Следующие шаги прямого хода делаются аналогично. Если система уравнений решается «на руках», то наглядности ради имеет смысл менять местами уравнения. При численной реализации на ЭВМ этого делать не стоит. Введем понятие целочисленного указательного массива p на простом численном примере системы размерности 3

$$\begin{bmatrix} 0 & 2 & 1 \\ 1 & 3 & 2 \\ 6 & 10 & 5 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 1 \\ 6 \end{Bmatrix} \quad (1.2.4)$$

с точным решением $x = [1, 0, 0]^T$. Размерность одномерного массива p совпадает с размерностью системы, первоначальные значения $p_i = i, i = 1 \div N$. На каждом шаге i после определения номера i_1 ведущего элемента $a_{i_1,i}^{(i-1)}$ в массиве p отыскивается элемент $p_k = i_1$ и меняются местами значения p_k и p_i .

Последовательность трех шагов метода Гаусса с выбором ведущего элемента по столбцам для системы (1.2.4) – рис. 1.2.2.

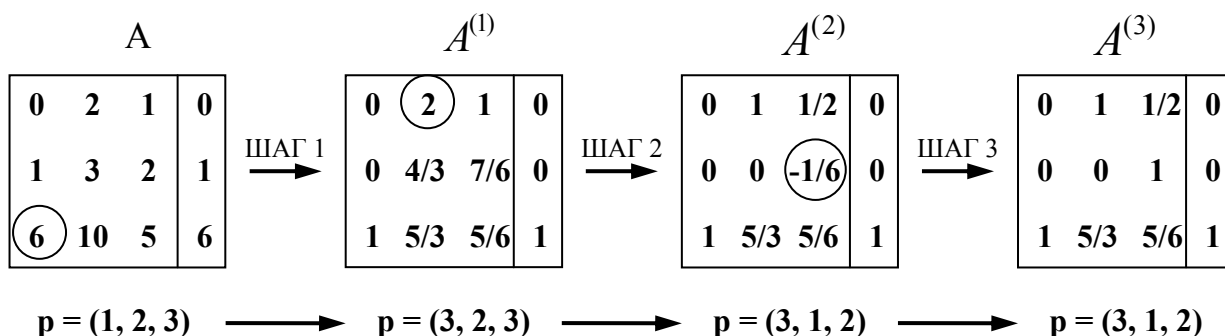


Рис. 1.2.2

Очевидно, что после окончания прямого хода в указанном массиве значение p_i будет равно номеру уравнения, с помощью которого исключается неизвестное x_i из системы уравнений (1.2.1).

Псевдокод прямого хода можно получить, следующим образом модифицируя псевдокод (1.2.2):

I. Всюду сделать формальную замену a_{ij} на $a_{p_i, j}$ для всех встречающихся индексов.

II. Сразу после открытия внешнего цикла по i вставить:

1) фрагмент для определения ведущего элемента $a_{i, i}$ из условия

$$|a_{i, i}| = \max_{k=i \div N} |a_{p_k, i}|;$$

2) фрагмент для определения индекса k из условия $p_k = i$ с последующим присвоением значений $p_k := p_i, p_i := i$.

В обратном ходе должны быть реализованы вычисления

$$x_i = a_{p_i, n+1} - \sum_{k=i+1}^n a_{p_i, k} x_k, \quad i = N \div 1. \quad (1.2.5)$$

1.2.3. Метод Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов

В методе Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов на первом шаге прямого хода ищется максимальный по модулю элемент во всей матрице \tilde{A} . Пусть это элемент a_{i_1, j_1} . Тогда уравнение i_1 -ое делится на a_{i_1, j_1} и с помощью этого уравнения из всех остальных уравнений исключается неизвестное x_{j_1} . На втором шаге ведущий элемент (максимальный по модулю) ищется среди элементов минора матрицы \tilde{A} , полученного вычеркиванием i_1 -ой строки и j_1 -ого столбца. Если это элемент a_{i_2, j_2} , то неизвестное x_{j_2} будет исключаться с помощью уравнения i_2 и т. д.

При численной реализации полной стратегии выбора ведущих элементов используются два указательных массива p и q . После выполнения прямого хода элементы p_i, q_i принимают значения, равные значениям индексов ведущего элемента $A_{p_i, q_i}^{(i)}$ i -ого шага.

Прямой ход метода Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов с использованием указательных массивов p, q применительно к системе (4) представлен на рис. 1.2.3.

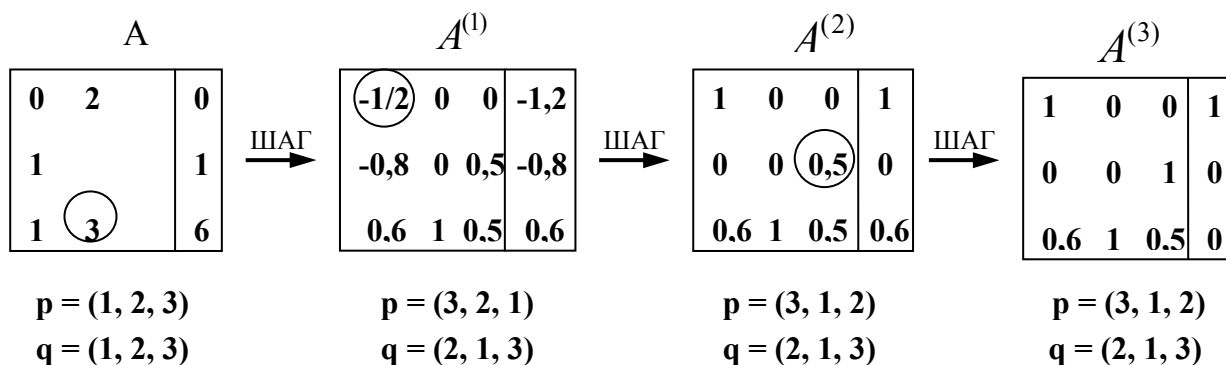


Рис. 1.2.3

1.2.4. Вычисление обратной матрицы с использованием метода Гаусса

Пусть в матрице A все главные миноры отличны от нуля, тогда:

1. Матрица A представима в виде $A = BC$, где B – нижняя треугольная матрица, C – верхняя треугольная матрица с единицами на главной диагонали, как показано на рис. 1.1.1.

2. Все ведущие элементы в схеме единственного деления в методе Гаусса отличны от нуля и матрица A за n шагов преобразуется к матрице $A^{(n)}$ – верхней треугольной матрице с единицами на главной диагонали, см. рис. 1.1.1.

3. Матрица $A^{(n)}$ совпадает с верхней треугольной матрицей из разложения п. 1, а матрицу B легко сформировать при реализации схемы единственного деления метода Гаусса:

$$B = \begin{bmatrix} a_{11} & & & & \\ a_{21} & a_{22}^{(1)} & & & 0 \\ a_{31} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(2)} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\ a_{n1} & a_{n2}^{(1)} & a_{n3}^{(2)} & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

Здесь $a_{ij}^{(k)}$ – элемент матрицы A после k -ого шага метода Гаусса (см. рис. 1.2.4).

Из определения обратной матрицы

$$AA^{-1} = E \quad (1.2.6)$$

следует, что i -й столбец обратной матрицы A_{*i}^{-1} удовлетворяет системе уравнений

$$AA_{*i}^{-1} = E_{*i}, \quad (1.2.7)$$

где E_{*i} — i -й столбец единичной матрицы.

Решение системы уравнений (1.2.7) относительно неизвестного столбца A_{*i}^{-1} обратной матрицы сводится к последовательному решению двух систем линейных уравнений с треугольными матрицами

$$\begin{aligned} By &= E_{*i}, \\ CA_{*i}^{-1} &= y. \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

Таким образом, для определения обратной матрицы A^{-1} необходимо один раз выполнить прямой ход метода Гаусса (схема единственного деления) с тем, чтобы получить матрицы B, C , а затем n раз для $i = 1 \div n$ решить системы уравнений (1.2.8).

Ранее, при обсуждении метода Гаусса с частичной стратегией выбора ведущих элементов, отмечалось, что если на каждом i -ом шаге после определения ведущего элемента $a_{i,i}^{(i-1)}$ менять местами уравнения i -ое и i_1 -ое, то портреты матриц на всех шагах преобразований будут такими, как показано на рис. 1.2.4.

Если в методе Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов на каждом i -ом шаге после определения ведущего элемента $a_{i,j_i}^{(i-1)}$ менять местами i -ое и i_1 -ое уравнения и перенумеровать неизвестные, вводя $z_i = x_{j_i}$, то для этих перенумерованных неизвестных портреты матрицы системы уравнений на каждом шаге опять будут иметь вид, как на рис. 1.2.4. Следовательно, методом Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов можно воспользоваться для определения обратной матрицы. Как и в схеме единственного деления, один раз получают матрицы \bar{B}, \bar{C} , которые с точностью до перестановок строк и столбцов являются треугольными, а затем n раз решают системы уравнений, аналогичные (1.2.8):

$$\bar{B}y = E_{*,q_i}, \quad \bar{C}A_{*,q_i}^{-1} = y. \quad (1.2.9)$$

При численной реализации строки не меняют местами и не перенумеровывают неизвестные, а используют указательные массивы p, q .

1.2.5. Определение ранга матрицы

Определение ранга матрицы на основе метода Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов базируется на следующем утверждении

линейной алгебры: если ранг матрицы A равен $k \leq N$, то перестановкой строк и столбцов можно получить матрицу, у которой главные миноры $A_i, i = 1 \div k$ отличны от нуля. Метод Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов по существу реализует это утверждение. Если менять местами соответствующие уравнения и перенумеровывать неизвестные, то матрица A преобразуется к верхней треугольной матрице (см. рис. 1.1.1) в случае, когда ранг матрицы A равен N , и к виду, представленному на рис. 1.2.4, когда $k < N$.

1									
1									
1									
1									
0	1								
	1								
	1								
	1								
	1								
k	0	0	0	0	0	0	...	0	
k+1	0	0	0	0	0	0	...	0	
	0	0	0	0	0	0	...	0	
	0	0	0	0	0	0	...	0	

Рис. 1.2.4

Метод Гаусса с полной стратегией выбора ведущих элементов идеально приспособлен для определения ранга матрицы. Если на всех шагах, включая k -ый шаг, метод успешно проработал, а на $(k + 1)$ -ом шаге ведущий элемент равен нулю, то ранг матрицы равен k .

Однако при численной реализации надо позаботиться о том, чтобы «мусор», который остался в элементах матрицы, не был принят за отличный от нуля элемент. Поясним выражение «мусор». Пусть выполняется ряд операций и точное значение результата, вычисленное в предположении, что все промежуточные операции проводятся без округлений, равно нулю. При вычислении на ЭВМ из-за ограниченности разрядной сетки округления неизбежны. Те, отличные от нуля значения, которые получают на ЭВМ там, где теоретически должен быть нуль, называют «мусором».

1.3. Метод квадратных корней

1.3.1. Системы с симметричными матрицами

Если матрица A симметрична и положительно определена, то она представима в виде произведения [2].

$$A = T^T T, \quad (1.3.1)$$

где T – действительная верхняя треугольная матрица с положительными элементами на главной диагонали (рис. 1.3.1).

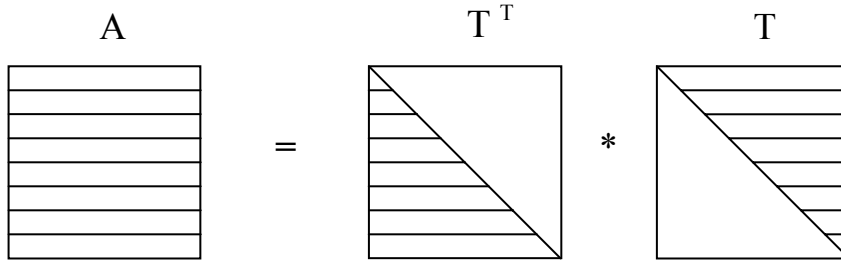


Рис. 1.3.1

Используя правило перемножения матриц и учитывая симметрию матрицы A нетрудно получить формулы для определения элементов матрицы T .

$$t_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki}^2}, \quad i=1 \div n, \quad (1.3.2)$$

$$t_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki} t_{kj} \right) / t_{ii}, \quad i=1 \div n, j=(i+1) \div n. \quad (1.3.3)$$

Подчеркнем, что в случае положительно определенной матрицы A формула (1.3.1) не приносит неприятностей, вычислительный процесс не выходит из области вещественных чисел. Для того, чтобы пользоваться формулами (1.3.2), (1.3.3), необходимо указать порядок определения элементов матрицы T , чтобы к моменту определения очередного элемента t_{ii} или t_{ij} все значения, стоящие в правых частях формул (1.3.2), (1.3.3), были известны. Для вычисления диагонального элемента t_{ii} необходимо знать все элементы, стоящие в i -ом столбце выше главной диагонали (см. рис. 1.3.2а).



Рис. 1.3.2

Для вычисления внедиагонального элемента t_{ij} из i -ой строки и j -ого столбца, необходимо знать все элементы матрицы T из i -ого столбца и элементы с 1-ого по $(i-1)$ -й, стоящие в j -ом столбце матрицы T (рис. 1.3.2б).

Очевидно, что построение матрицы T по строкам обеспечивает своевременное определение элементов T в формулах (1.3.2), (1.3.3):

для i от 1 до N

нц

вычисление i -ой строки T , начиная с диагонального элемента t_{ii} (1.3.4) и кончая элементом t_{in}

кц

Если матрица A представлена в виде (1.3.1), то решение системы уравнений

$$Ax = f \quad (1.3.5)$$

сводится к последовательному решению двух систем уравнений с треугольными матрицами

$$T^T y = f, \quad (1.3.6)$$

$$Tx = f. \quad (1.3.7)$$

которые в символическом виде изображены на рис. 1.3.3.

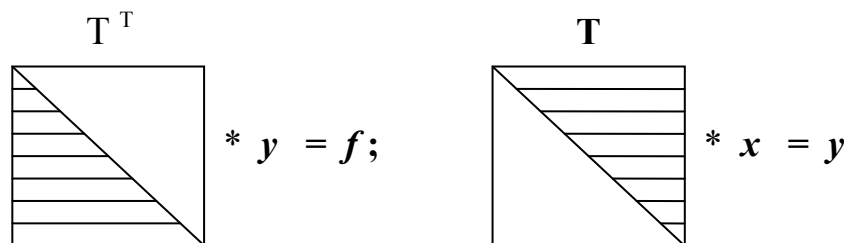


Рис. 1.3.3

Формулы для определения компонент векторов y, x имеют вид

$$y_i = \left(f_i - \sum_{k=1}^{i-1} t_{ki} y_k \right) / t_{ii}, \quad i = 1 \div N, \quad (1.3.8)$$

$$x_i = \left(y_i - \sum_{k=i+1}^N t_{ik} x_k \right) / t_{ii}, \quad i = N \div 1. \quad (1.3.9)$$

Определение матрицы T по формулам (1.3.2), (1.3.3) называется прямым ходом метода квадратных корней, а определение векторов y, x по формулам (1.3.8), (1.3.9) – обратным ходом метода квадратных корней.

1.3.2. Метод квадратных корней для систем линейных уравнений с ленточными матрицами

Определение ленточных матриц, связи индексов элементов, лежащих на границе ленты, функциях $k0(i)$, $kN(i)$ дано в разделе 1.1.3.

Обратимся к формуле (1.3.2). В ней присутствует сумма квадратов элементов i -ого столбца, стоящего выше i -ой строки. В ленточной матрице от-

личные от нуля элементы i -ого столбца начинаются с номера $k0(i)$ (см. рис. 1.1.7). Поэтому формула (1.3.2) для ленточных матриц принимает вид:

$$t_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=k0(i)}^{i-1} t_{ki}^2}, \quad i = 1 \div n. \quad (1.3.10)$$

Под знаком суммы в формуле (1.3.3) стоит произведение элементов из i -ого и j -ого столбцов, причем $j > i$. Очевидно, что t_{ki} и t_{kj} одновременно отличны от нуля, если $k \geq k0(j)$. Поэтому формула (1.3.3) записывается как

$$t_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=k0(j)}^{i-1} t_{ki} t_{kj} \right) / t_{ii}, \quad i = 1 \div n, j = (i+1) \div kN(i). \quad (1.3.11)$$

1.3.3. Расчетные формулы метода квадратных корней при хранении ленточных матриц в прямоугольных массивах

Расчетные формулы (1.3.10), (1.3.11) при хранении ленточных матриц в прямоугольных массивах преобразуются в соответствии с выбранной формой хранения. Рассмотрим один из них. Пусть верхняя часть ленты хранится в массиве P размерности $N \times L$ (рис. 1.1.10), а для хранения верхней треугольной ленточной матрицы T отведен прямоугольный массив Q размерности $N \times L$. Тогда формулы (1.3.10), (1.3.11) с учетом вида преобразования индексов (1.1.22) запишутся следующим образом:

$$Q_{i,1} = \sqrt{P_{i,1} - \sum_{k=k0(i)}^{i-1} Q_{k,i-k+1}^2}, \quad i = 1 \div n, \quad (1.3.12)$$

$$Q_{i,j-i+1} = \left(P_{i,j-i+1} - \sum_{k=k0(j)}^{i-1} Q_{k,i-k+1} Q_{k,j-k+1} \right) / Q_{i,1}, \quad (1.3.13)$$

$$i = 1 \div n, j = (i+1) \div kN(i).$$

Напомним, что порядок вычисления элементов матрицы T , хранящейся в прямоугольном массиве Q , должен быть таким же, как для матриц размерности $N \times L$. Распишем более подробно алгоритм (1.3.4), подставив в него соотношения (1.3.12), (1.3.13)

для i от 1 до N

нц

$S := P_{i,1}$

для k от $k0(i)$ до $i-1$

нц

$S := S - Q_{k,i-k+1}^2$

кц

$Q_{i,1} := S;$

для j от $i+1$ до $kN(i)$

НЦ
 $S := P_{i,j-i+1}$
 для k от $k_0(i)$ до $i-1$
НЦ
 $S := S - Q_{k,i-k+1} * Q_{k,j-k+1}$
КЦ
 $Q_{i,j-i+1} := S / Q_{i,1}$
КЦ
КЦ

Расчетные формулы обратного хода (1.3.8), (1.3.9) преобразуются аналогично.

1.4. Методы, основанные на QR разложении матриц

Пусть матрица системы уравнений $Ax = f$ представлена в виде произведения QR

$$A = QR, \quad (1.4.1)$$

где Q – ортогональная матрица ($Q^{-1} = Q^T$), R – верхняя треугольная матрица. Если QR -разложение получено, то исходная система уравнений эквивалентна системе

$$QRx = f, \quad (1.4.2)$$

которая ввиду ортогональности матрицы Q равносильна системе

$$Rx = Q^T f. \quad (1.4.3)$$

Если матрица A исходной системы не вырождена, то на главной диагонали треугольной матрицы R не может быть нулей. Следовательно, решая систему (1.4.3) с верхней треугольной матрицей, получаем вектор x решения исходной системы уравнений. Заметим, что для решения систем линейных алгебраических уравнений QR -разложение в явном виде, вообще говоря, не требуется. Целью является получение системы в виде (1.4.3) и выполнение обратного хода метода. Иными словами, ортогональными преобразованиями исходную систему уравнений нужно привести к виду (1.4.3), используя преобразования Хаусхолдера в методе отражений и преобразования Гивенса в методе вращений.

1.4.1. Метод отражений (метод Хаусхолдера)

Замечания о преобразовании отражения Хаусхолдера [3].

1. Матрицей Хаусхолдера, построенной по единичному вектору w , называется матрица

$$H = E - 2ww^T. \quad (1.4.4)$$

Матрица Хаусхолдера симметрична и ортогональна. Элементы матрицы Хаусхолдера легко выписываются в виде:

$$H_{ij} = \delta_{ij} - 2w_i w_j, \quad (1.4.5)$$

где δ_{ij} – символ Кронекера.

Рассмотрим некоторый ненулевой вектор $x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ и вычислим две скалярные величины β, μ и вектор w :

$$\beta = \begin{cases} \text{sign}(-x_1) \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}, & \text{если } x_1 \neq 0, \\ \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}, & \text{если } x_1 = 0. \end{cases} \quad (1.4.6)$$

$$\mu = \frac{1}{\sqrt{2\beta^2 - 2\beta x_1}}, \quad (1.4.7)$$

$$w = \mu(x_1 - \beta, x_2, \dots, x_n)^T. \quad (1.4.8)$$

Нетрудно видеть, что вектор w единичный. Показано [3], что вектор x преобразуется матрицей Хаусхолдера, построенной по вектору (1.4.8), в вектор со всеми нулевыми компонентами, кроме первой, которая будет равна β :

$$(\beta, 0, 0, \dots, 0)^T = H(x_1, x_2, \dots, x_n)^T. \quad (1.4.9)$$

2. Пусть матрица Хаусхолдера умножается на матрицу A . Тогда с учетом (1.4.4), (1.4.5) выпишем цепочку равенств для элемента (i, j) этого произведения.

$$(HA)_{ij} = ((E - 2ww^T)A)_{ij} = A_{ij} - 2 \sum_{k=1}^n (ww^T)_{ik} A_{kj} = A_{ij} - 2w_i \sum_{k=1}^n w_k A_{kj}. \quad (1.4.10)$$

Заметим, что сумма $\sum_{k=1}^n w_k A_{kj}$ не зависит от индекса i . Поэтому вычислять произведение матриц HA целесообразно по столбцам, один раз для всего j -ого столбца вычислив сумму $\sum_{k=1}^n w_k A_{kj}$.

3. Произведение HA есть матрица, каждый столбец которой можно рассматривать как столбец матрицы A , преобразованный с помощью матрицы Хаусхолдера.

Символическое изображение прямого хода метода отражений совпадает с символическим изображением прямого хода метода Гаусса (рис. 1.2.1) с той лишь разницей, что в преобразованных матрицах на главной диагонали стоят элементы, не обязательно равные единице.

На первом шаге роль преобразуемого вектора x из замечания 1 играет первый столбец $(a_{11}, a_{21} \dots a_{n1})^T$ матрицы A . Умножая систему уравнений (или, что фактически то же, расширенную матрицу системы) на матрицу Хаусхолдера, построенную по вектору (1.4.8), получаем матрицу $A^{(1)}$ (рис. 1.2.1) за исключением того, что $A_{11}^{(1)} = \beta$ (1.4.9).

На втором шаге аналогичные преобразования проводятся с подматрицей матрицы $A^{(1)}$, которая получается вычеркиванием в $A^{(1)}$ первой строки и первого столбца. (Первый столбец и первая строка, как и в методе Гаусса больше не преобразуются). Легко показать, что формально преобразование этой матрицы равносильно применению ко всей матрице $A^{(1)}$ преобразования Хаусхолдера, определяемого вектором

$$w_2 = \mu_2 (0, A_{22}^{(1)} - \beta_2, A_{32}^{(1)}, \dots, A_{n2}^{(1)}), \quad (1.4.11)$$

где

$$\beta_2 = \begin{cases} \text{sign}(-A_{22}^{(1)}) \sqrt{\sum_{i=2}^n (A_{i2}^{(1)})^2}, & \text{если } A_{22}^{(1)} \neq 0, \\ \sqrt{\sum_{i=2}^n (A_{i2}^{(1)})^2}, & \text{если } A_{22}^{(1)} = 0. \end{cases} \quad (1.4.12)$$

$$\mu_2 = \frac{1}{\sqrt{2\beta_2^2 - 2\beta_2 A_{22}^{(1)}}}. \quad (1.4.13)$$

После второго шага преобразованная расширенная матрица $A^{(2)}$ имеет структуру, как на рис. 1.2.1 (за исключением единиц на диагонали).

Очевидно, что для приведения исходной матрицы к верхнетреугольному виду, необходимо сделать $(n - 1)$ шаг. Правая часть системы (1.4.3) будет записана в $(n + 1)$ -ом столбце матрицы $A^{(n-1)}$.

Единственной неприятностью при выполнении описанных преобразований может оказаться невозможность вычислить значение μ_i на i -ом шаге ($i = 1 \div (n - 1)$) из-за обращения в нуль знаменателя. Обращение в нуль знаменателя означает, что у i -ого столбца поддиагональные элементы – нули, т. е. столбец уже имеет нужный вид. Поэтому при численной реализации метода необходимо предусмотреть отмену обработки столбцов такого вида.

1.4.2. Метод вращений (метод Гивенса)

Замечания о преобразовании вращения Гивенса.

1. Матрица Гивенса T_{ij} (матрица вращений, матрица простого поворота) – это матрица, отличающаяся от единичной матрицы четырьмя элементами, расположенными на пересечении строк и столбцов с номерами i, j .

$$T_{ij} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \text{i} \\ \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & & \\ \hline & 1 & \\ \hline & & 1 \\ \hline & & & 1 \\ \hline \end{array} \\ \text{i} \\ \text{j} \end{array} \begin{array}{cc} \begin{array}{cc} C & S \\ S & C \end{array} \end{array} \end{array}, \quad \text{где} \quad c^2 + s^2 = 1$$

2. Матрицы Гивенса ортогональны ($T_{ij}^{-1} = T_{ij}^T$), произведение двух или более матриц вращения Гивенса есть ортогональная матрица.

3. При умножении вектора \mathbf{b} справа на матрицу T_{ij} вектор $\tilde{\mathbf{b}} = T_{ij}\mathbf{b}$ совпадает с вектором \mathbf{b} за исключением i, j элементов:

$$\begin{aligned} \tilde{b}_i &= cb_i + sb_j, \\ \tilde{b}_j &= -sb_i + cb_j. \end{aligned} \quad (1.4.14)$$

4. При умножении матрицы A слева на матрицу T_{ij} матрица $\tilde{A} = T_{ij}A$ совпадает с матрицей A за исключением i, j строки. Элементы этих строк преобразуются по формулам:

$$\begin{aligned} \tilde{A}_{ik} &= cA_{ik} + sA_{jk} \\ \tilde{A}_{jk} &= -sA_{ik} + cA_{jk} \end{aligned} \quad k = 1 \div n \quad (1.4.15)$$

5. Для того, чтобы $\tilde{A}_{ji} = 0$, достаточно положить

$$c = \frac{A_{ii}}{\sqrt{A_{ii}^2 + A_{ji}^2}}, \quad s = \frac{A_{ji}}{\sqrt{A_{ii}^2 + A_{ji}^2}}. \quad (1.4.16)$$

Метод вращений решения систем линейных уравнений – это метод, приводящий исходную систему уравнений к системе с верхнетреугольной матрицей посредством последовательности преобразований вращения, т. е. путем последовательных умножений системы уравнений слева на ортогональные матрицы Гивенса. Прямой ход метода вращений состоит из $(n - 1)$ шага.

ШАГ 1. Неизвестное x_1 исключается из всех уравнений, кроме первого. Исходная система уравнений последовательно умножается на матрицы вращений $T_{12}, T_{13}, \dots, T_{1n}$. Параметры c, s для каждой из матриц T_{1j} , $j = 2 \div n$ подбираются так, чтобы в преобразованной матрице системы уравнений элемент с индексами $(j, 1)$, был равен нулю (см. (1.4.16)). Понятно, что при численной реализации каждое умножение системы уравнений на матрицу вращений заменяется переформированием соответствующих строк матрицы системы согласно формулам (1.4.15) и соответствующих элементов вектора правой части по формулам (1.4.14). Подчеркнем, что на 1-ом шаге 1-ое уравнение преобразовывается $(n - 1)$ раз. После выполнения 1-ого шага 1-ое

уравнение преобразовываться не будет, а в матрице системы уравнений все поддиагональные элементы первого столбца равны нулю.

ШАГ 2. Для исключения неизвестного x_2 из всех уравнений, начиная с третьего, система уравнений, полученная после ШАГА 1, последовательно умножается слева на матрицы вращений $T_{23}, T_{24}, \dots, T_{2n}$. При численной реализации фактическое умножение не производится, а переопределяются соответствующие строки матриц и элементы столбца правой части, причем второе уравнение преобразовывается $(n - 2)$ раза. После окончания второго шага 2-ое уравнение больше меняться не будет, а в матрице системы все поддиагональные элементы второго столбца равны нулю.

ШАГ 3, ШАГ 4, ..., ШАГ $(n - 1)$ выполняются аналогично.

После выполнения всех шагов матрица системы принимает верхнетреугольный вид и реализация обратного хода не представляет труда.

2. Методы решения задач на собственные значения $Ax = \lambda x$

Ниже приведено несколько методов определения собственных значений λ и собственных векторов x для симметричных матриц $A \in R_{n \times n}$. Рассмотрение только симметричных матриц объясняется двумя причинами. Во-первых, такие матрицы очень просто устроены с точки зрения спектральной задачи (все собственные значения действительны), во-вторых, симметричные матрицы часто возникают в инженерных расчетах. Кроме того, оставим в стороне случаи кратных собственных значений или совпадения их модулей. Будем считать, что собственные значения пронумерованы в порядке возрастания их модулей, т. е.

$$|\lambda_1| < |\lambda_2| < \dots < |\lambda_n|. \quad (2.1.1)$$

2.1. Степенной метод (метод прямых итераций)

Степенной метод приспособлен для нахождения наибольшего по модулю собственного значения λ_n и соответствующего ему собственного вектора x_n .

Пусть $x^{(0)}$ – произвольный вектор из R_n . Вычисления итерационного процесса ведутся по схеме

$$\begin{cases} v^{(k)} = x^{(k)} / \|x^{(k)}\| \\ x^{(k+1)} = A v^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.1.2)$$

с попутным вычислением чисел

$$\sigma^{(k)} = v^{(k)T} x^{(k+1)}. \quad (2.1.3)$$

Показано [4], что

$$\begin{cases} \sigma^{(k)} \rightarrow \lambda_n \\ \nu^{(k)} \rightarrow \pm x_n \end{cases}, k \rightarrow \infty. \quad (2.1.4)$$

Замечание 1. Во всех приведенных методах берутся евклидовы нормы векторов, т. е.

$$\|x\| = \sqrt{x^T x}.$$

Замечание 2. Если x_1, x_2, \dots, x_n – ортонормированный базис, составленный из собственных векторов матрицы A , то вектор начального приближения $x^{(0)}$ разложим по этому базису:

$$x^{(0)} = \sum_{i=1}^n \xi_i x_i.$$

В степенном методе предполагается, что $\xi_n = -x_n^T x^{(0)} \neq 0$, т. е. что $x^{(0)}$ не ортогонален x_n .

Замечание 3. Скорость сходимости (2.1.2) зависит от отношения $\left| \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n} \right|$:

$$\begin{aligned} \sigma^{(k)} &= \lambda_n \left[1 + O \left(\left| \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n} \right|^{2k} \right) \right] \\ \nu^{(k)} &= \left(\frac{\lambda_n}{|\lambda_n|} \right)^k \frac{\xi_n}{|\xi_n|} \left[x_n + O \left(\left| \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n} \right|^k \right) \right] \end{aligned} \quad (2.1.5)$$

Если отношение $\left| \frac{\lambda_{n-1}}{\lambda_n} \right|$ близко к единице, то сходимость медленная. Последовательность $\sigma^{(k)}$ всегда сходится быстрее, чем последовательность векторов $\nu^{(k)}$.

2.2. Метод исчерпывания

Если пара (λ_n, x_n) найдена, то степенной метод можно применить для вычисления пары (λ_{n-1}, x_{n-1}) . Введем в рассмотрение матрицу

$$A^{(1)} = A - \lambda_n x_n x_n^T. \quad (2.2.1)$$

После выбора начального приближения $x^{(0)}$ итерационный процесс организуется по схеме

$$\begin{cases} \nu^{(k)} = x^{(k)} / \|x^{(k)}\| \\ x^{(k+1)} = A^{(1)} \nu^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2.2)$$

При этом $\nu^{(k)} \rightarrow \pm x_{n-1}$, $\sigma^{(k)} = \nu^{(k)T} x^{(k+1)} \rightarrow \lambda_{n-1}$ при $k \rightarrow \infty$.

Замечание 1. Можно обойтись без непосредственного определения матрицы $A^{(1)}$, проводя вычисления по схеме

$$\begin{cases} \nu^{(k)} = x^{(k)} / \|x^{(k)}\| \\ x^{(k+1)} = A \nu^{(k)} - \lambda_n x_n x_n^T \nu^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2.3)$$

Замечание 2. Теоретически подобным образом можно найти весь спектр матрицы A . Однако из-за ошибок округлений это сделать не удастся. Обычно, с достаточной степенью точности определяют лишь две – три последние собственные пары.

2.3. Метод обратных итераций

Если матрица A невырожденная, то наибольшее по модулю собственное значение матрицы $A^{(-1)}$ будет равно $1/\lambda_1$. Итерационная схема (2.1.2), примененная к матрице $A^{(-1)}$, имеет вид

$$\begin{cases} \nu^{(k)} = x^{(k)} / \|x^{(k)}\| \\ x^{(k+1)} = A^{-1} \nu^{(k)} \Leftrightarrow Ax^{(k+1)} = \nu^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.3.1)$$

причем $\alpha^{(k)} = \nu^{(k)T} x^{(k+1)} \rightarrow 1/\lambda_1$, $\nu^{(k)} \rightarrow \pm x_1$ при $k \rightarrow \infty$. На каждом итерационном шаге вектор $x^{(k+1)}$ находится как решение системы линейных уравнений $Ax^{(k+1)} = \nu^{(k)}$.

Замечание 1. Скорость сходимости итерационного процесса (с8) зависит от отношения $\left| \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right|$:

$$\begin{aligned} \alpha^{(k)} &= \frac{1}{\lambda_1} \left[1 + O \left(\left| \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right|^{2k} \right) \right], \\ \nu^{(k)} &= \left(\frac{\lambda_1}{|\lambda_1|} \right)^k \frac{\xi_1}{|\xi_1|} \left[x_1 + O \left(\left| \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \right|^k \right) \right] \rightarrow \pm x_1. \end{aligned} \quad (2.3.2)$$

Замечание 2. Если применить к матрице A процессы прямой и обратной итераций, то можно вычислить ее число обусловленности

$$\mu(A) = \left| \frac{\lambda_n}{\lambda_1} \right|.$$

2.4. Метод обратных итераций с исчерпыванием

Если пара (λ_1, x_1) найдена, то следующую пару (λ_2, x_2) можно найти, применяя итерационный процесс (2.1.2) к матрице $B = A^{-1}(E - x_1 x_1^T)$:

$$\begin{cases} \nu^{(k)} = x^{(k)} / \|x^{(k)}\| \\ Ax^{(k+1)} = (E - x_1 x_1^T) \nu^{(k)}, \end{cases} \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.4.1)$$

при этом $\nu^{(k)} \rightarrow \pm x_2$, $\alpha^{(k)} = \nu^{(k)T} x^{(k+1)} \rightarrow 1/\lambda_2$ при $k \rightarrow \infty$.

Замечание 3. Если для решения системы уравнений с матрицей A применяется один из методов LU-разложения матрицы A , то один раз найденное LU-разложение используется и для определения пары (λ_1, x_1) , и для определения пары (λ_2, x_2) .

2.5. Обобщенная задача на собственные значения

Обобщенная задача на собственные значения

$$Ax = \lambda Bx \quad (2.5.1)$$

часто встречается в прикладных задачах, например при определении спектра частот собственных колебаний упругой конструкции. Будем полагать, что

$$A = A^T, B = B^T > 0. \quad (2.5.2)$$

Поскольку $B > 0$, то разложение по методу квадратных корней

$$B = SS^T \quad (2.5.3)$$

происходит в области действительных чисел и нижняя треугольная матрица S имеет положительные элементы на главной диагонали. Вводя обозначение $y = S^T x$, запишем

$$Ax = \lambda Bx \Leftrightarrow AS^{-T}y = \lambda Sy \Leftrightarrow S^{-1}AS^{-T}y = \lambda y$$

Таким образом, обобщенная проблема собственных значений (2.12) сводится к обычной проблеме собственных значений для симметричной матрицы

$$\tilde{A} = S^{-1}AS^{-T} \quad (2.5.4)$$

2.6. Метод вращений Якоби

Напомним, что матрицы A и B называются подобными, если существует невырожденная матрица C такая, что $B = C^{-1}AC$.

Метод вращений Якоби основан на следующих утверждениях о матричных преобразованиях подобия и свойствах матриц вращения.

1. Если (λ_B, x_B) – собственная пара матрицы $B = C^{-1}AC$, то (λ_B, Cx_B) – собственная пара матрицы A , т. е. $\lambda_A = \lambda_B, x_A = Cx_B$.

2. Если A – матрица простой структуры, $\Lambda = \text{diag}(\lambda_i)$ – диагональная матрица, T – квадратная матрица, i -й столбец, который является собственным вектором, соответствующим собственному значению λ_i , то справедли-

во равенство $\Lambda = T^{-1}AT$. (Матрица A является матрицей простой структуры, если она имеет ровно n линейно независимых собственных векторов).

3. Если A – симметрично вещественная квадратная матрица, то существует диагональная матрица Λ , ей ортогонально подобная, т. е. $\Lambda = T^T AT$ ($T^{-1} = T^T$).

4. Матрица вращений, получающаяся из единичной матрицы путем замены двух единиц и двух нулей на пересечениях i -ых и j -ых строк и столбцов числами $c, \pm s$, как показано в (2.6.1), является ортогональной матрицей, т. е. $T_{ij}^T = T_{ij}^{-1}$.

$$T_{ij} = \begin{array}{cc|cc|cc} & & i & & j & \\ & & | & & | & \\ & & \vdots & & \vdots & \\ & & | & & | & \\ 1 & & & & & 0 \\ & & \vdots & & \vdots & \\ \cdots & c & \cdots & -s & \cdots & \\ & \vdots & & \vdots & & \\ \cdots & s & \cdots & c & \cdots & \\ & \vdots & & \vdots & & \\ 0 & & & & & 1 \end{array} \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ i \\ j \\ \\ \end{array}, \quad \text{где} \quad c^2 + s^2 = 1 \quad (2.6.1)$$

Рис. 2.6.1

5. При умножении матрицы слева на матрицу T_{ij}^T меняются только i -ая и j -ая строки, то есть если $\tilde{A} = T_{ij}^T A$, то

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{im} &= ca_{im} + sa_{jm}, & m = 1, 2, \dots, n \\ \tilde{a}_{jm} &= -sa_{im} + ca_{jm}, & m = 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.6.2)$$

а остальные элементы матрицы \tilde{A} совпадают с соответствующими элементами матрицы A .

6. При умножении матрицы справа на матрицу T_{ij} меняются только i -ый, j -ый столбцы, т. е. если $\tilde{A} = AT_{ij}$, то

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{li} &= c\tilde{a}_{li} + s\tilde{a}_{lj}, & l = 1, 2, \dots, n, \\ \tilde{a}_{lj} &= -s\tilde{a}_{li} + c\tilde{a}_{lj}, & l = 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (2.6.3)$$

а остальные элементы матрицы \tilde{A} совпадают с соответствующими элементами матрицы A .

7. Преобразование подобия $\tilde{\tilde{A}} = T_{ij}^T AT_{ij}$ меняет в матрице A i -ые, j -ые строки и столбцы.

8. Если матрица A симметричная, то матрица $\tilde{\tilde{A}} = T_{ij}^T AT_{ij}$ также симметричная.

9. Если в матрице вращения T_{ij} положить

$$c = \cos \varphi, \quad s = \sin \varphi, \quad (2.6.4)$$

а угол φ определять из равенства

$$\operatorname{tg} 2\varphi = \frac{2a_{ij}}{a_{ii} - a_{jj}}, \quad (2.6.5)$$

то в матрице $\tilde{A} = T_{ij}^T A T_{ij}$ элементы \tilde{a}_{ij} , \tilde{a}_{ji} будут равны нулю.

$$\tilde{a}_{ij} = \tilde{a}_{ji} = 0. \quad (2.6.6)$$

Метод вращений Якоби определения всех собственных значений и собственных векторов симметричной матрицы A состоит в построении такой последовательности матриц

$$A^0 (:= A), A^1, A^2, \dots, A^k, \dots \quad (2.6.7)$$

с помощью преобразований подобия

$$A^{k+1} = T_{i_k j_k}^T A^k T_{i_k j_k}, \quad (2.6.8)$$

что на каждом $(k+1)$ -ом шаге обнуляется максимальный по модулю внедиагональный элемент $a_{i_k j_k}^k$ матрицы A^k . Доказано, что последовательность A^k сходится при $k \rightarrow \infty$ к диагональной матрице $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_i)$.

Если за меру отклонения матрицы A от диагональной принять величину суммы квадратов внедиагональных элементов

$$t(A) = \sum_{i \neq j} |a_{ij}|^2, \quad (2.6.9)$$

то можно показать, что

$$t(A^{k+1}) = t(A^k) - 2(a_{i_k j_k}^k)^2. \quad (2.6.10)$$

Кроме того, последовательность $t(A^k)$ сходится к нулю ($k \rightarrow \infty$) со скоростью, не меньшей скорости сходимости геометрической прогрессии со знаменателем $q = 1 - \frac{2}{n(n-1)} < 1$, где n – размерность матрицы A .

Окончанием процесса вращений Якоби при некотором $k = K$ может служить либо достаточная малость максимального по модулю внедиагонального элемента, либо малость меры отклонения матрицы A^K от диагональной.

За собственные векторы x_1, x_2, \dots, x_n матрицы A могут быть приближенно приняты столбцы результирующей матрицы T , получающиеся справа от матрицы A в цепочке преобразования подобия, то есть столбцы матрицы

$$T = T_{i_0 j_0} T_{i_1 j_1} \cdot \dots \cdot T_{i_K j_K}. \quad (2.6.11)$$

Заметим, что при численной реализации недопустимо при определении матрицы T применять матричное умножение.

Замечание 1. Наибольшие требования к точности вычислений в методе вращений Якоби предъявляются при определении значений c, s из матриц вращения T_{ij} , поскольку погрешности вычислений c, s нарушают ортогональность матриц T_{ij} , что приводит к неустраняемым погрешностям метода. Итерационный по форме метод вращений Якоби не является итерационным методом в том смысле, что он не обладает свойством самоисправляемости,

присущим методам последовательных приближений. Для уменьшения погрешности вычислений значений c, s можно поступить следующим образом:

1. Вычислить $p = 2a_{ij}$, $q = a_{ii} - a_{jj}$, $d = \sqrt{p^2 + q^2}$. (2.6.12)
2. Если $q=0$, то $c=s=\sqrt{2}/2$.
3. Если $q \neq 0$, то $r = |q|/(2d)$, $c = \sqrt{0.5+r}$, $s = \sqrt{0.5-r} \cdot \text{sign}(pq)$.

Замечание 2. При численной реализации метода вращений необходимо учитывать симметрию матриц A^k , $k = 1, 2, \dots, K$, аккуратно применяя формулы (2.6.2), (2.6.3).

Замечание 3. Матрицу (2.6.1) называют матрицей левого вращения. Можно рассматривать матрицу правого вращения $P_{ij} = T_{ij}^T$. Тогда расчетные формулы для элементов матриц $\tilde{A} = P_{ij}^T A, \tilde{\tilde{A}} = \tilde{A} P_{ij}$, аналогичные формулам (2.6.2), (2.6.3), примут вид

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{im} &= ca_{im} - sa_{jm} & \tilde{\tilde{a}}_{mi} &= c\tilde{a}_{mi} - s\tilde{a}_{mj} \\ \tilde{a}_{im} &= sa_{im} + ca_{im} & \tilde{\tilde{a}}_{mi} &= s\tilde{a}_{mi} + c\tilde{a}_{mj}, \quad m=1, 2, \dots, n \end{aligned} \quad (2.6.13)$$

Угол вращения φ определится из уравнения

$$tg 2\varphi = \frac{2a_{ij}}{a_{ji} - a_{ij}}. \quad (2.6.14)$$

В остальном метод правого вращения Якоби полностью аналогичен описанному выше методу левого вращения Якоби.

3. Переопределенные системы линейных уравнений

Система линейных уравнений

[illegible]

называется переопределенной, если $n > s$. Далее будем рассматривать системы уравнений с матрицами A полного ранга, т.е с матрицами A ранга S (прямоугольная матрица размерности $n \times s$ называется полной, если ее ранг совпадает с минимальным из чисел n, s).

Под обобщенным решением системы (3.1) будем понимать тот вектор $x^* \in R_s$, который минимизирует функционал невязки.

$$\Phi(x) = \|Ax - f\| \quad (3.2)$$

Имеет место следующая теорема.

Теорема. Пусть столбцы матрицы A линейно независимы, т. е. ранг A равен S . Тогда существует одно и только одно обобщенное решение x^* системы (3.1). Обобщенное решение x^* является классическим решением системы

$$A^T A x = A^T f, \quad (3.3)$$

которая содержит s скалярных уравнений относительно неизвестных x_1, x_2, \dots, x_s .

На практике бывает часто важно, чтобы какое-либо уравнение или группа уравнений, удовлетворялись более точно. Для этого вводят n положительных весовых множителей $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$. Здесь множитель β_i соответствует i -ому уравнению. Если все $\beta_i = 1$, то все уравнения исходной системы (3.1) имеют одинаковый вес. Если величину веса для какого-то уравнения сделать больше (меньше) единицы, то это уравнение будет удовлетворяться более (менее) точно. Пусть $B \in R_{n \times n}$ – диагональная квадратная матрица с положительными элементами на главной диагонали $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$. Тогда обобщенное решение системы (3.1) с весами $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$ является классическим решением системы

$$A^T B A x = A^T B f, \quad (3.4)$$

содержащей s линейных скалярных уравнений относительно s неизвестных x_1, x_2, \dots, x_s .

В заключение отметим, что при $n = s$ обобщенное решение системы (3.1) совпадает с его классическим решением.

4. О решении систем линейных уравнений в комплексной области

Покажем, что решение систем линейных уравнений размерности N

$$A x = b \quad (4.1)$$

с комплексными коэффициентами легко сводится к решению систем линейных уравнений с действительными коэффициентами размерности $2N$.

Представим комплексную матрицу A , вектор правой части b и решение x в виде

$$A = A_1 + i A_2, \quad (4.2)$$

$$b = b_1 + i b_2, \quad (4.3)$$

$$x = x_1 + i x_2. \quad (4.4)$$

Здесь A_1, A_2 – действительные матрицы размерности $N \times N$, b_1, b_2, x_1, x_2 – действительные векторы размерности N . Подставим выражения (4.2)–(4.4) в систему (4.1):

$$(A_1 + i A_2)(x_1 + i x_2) = b_1 + i b_2. \quad (4.5)$$

Приравняем действительные и мнимые части в левой и правой частях матричного уравнения (4.5)

$$\begin{cases} A_1 x_1 - A_2 x_2 = b_1 \\ A_2 x_1 + A_1 x_2 = b_2 \end{cases} \quad (4.6)$$

Нетрудно видеть, что два матричных уравнения (4.6) образуют линейную систему уравнений размерности $2N$ относительно вектора неизвестных $[x_1, x_2]^T$:

$$\begin{bmatrix} A_1 & -A_2 \\ A_2 & A_1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{Bmatrix} \quad (4.7)$$

Таким образом, система линейных уравнений (4.6) размерности N с комплексными коэффициентами эквивалентна системе линейных уравнений (4.7) размерности $2N$ с действительными коэффициентами.

Литература

1. Самарский А.А. Численные методы : учеб. пособие для студ. вузов / А.А. Самарский, А.В. Гулин. – М. : Наука : Физматлит, 1989 . – 429 с.
2. Демидович Б.П. Основы вычислительной математики : учеб. пособие / Б.П. Демидович, И.А. Марон. – 5-е изд., стереотип. – СПб. : Лань, 2006. – 664 с.
3. Вержбицкий В.М. Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения : учеб. пособие для студ. вузов / В.М. Вержбицкий. – М. : Высшая школа, 2000. – 265 с.
4. Калиткин Н.Н. Численные методы : учеб. пособие для студ. вузов / Н.Н. Калиткин ; под. ред. А.А. Самарского. – М. : Наука, 1978. – 512 с.

Учебное издание

**Корзунина Вера Васильевна,
Шабунина Зоя Александровна**

**ЛАБОРАТОРНЫЙ ПРАКТИКУМ
ПО ЧИСЛЕННЫМ МЕТОДАМ**

ЧАСТЬ 1. ТЕОРИЯ

Учебное пособие

Редактор С.Ю. Дробина

Подп. в печ. 27.12.2011. Формат 60×84/16.
Усл. печ. л. 2,1. Тираж 25 экз. Заказ 776.

Издательско-полиграфический центр
Воронежского государственного университета.
394000, г. Воронеж, пл. им. Ленина, 10. Тел. (факс): +7 (473) 259-80-26
<http://www.ppc.vsu.ru>; e-mail: pp_center@ppc.vsu.ru

Отпечатано в типографии
Издательско-полиграфического центра
Воронежского государственного университета.
394000, г. Воронеж, ул. Пушкинская, 3. Тел. +7 (473) 220-41-33