

Лекция 9

§ 5.6. Применение метода Гаусса к решению задач линейной алгебры

1.Вычисление решений системы уравнений с несколькими правыми частями. Довольно часто на практике встречается ситуация, когда нужно решить несколько систем линейных алгебраических уравнений

$$Ax = d_{(1)}, Ax = d_{(2)}, \dots, Ax = d_{(p)} \quad (5.41)$$

с одной матрицей A и различными правыми частями $d_{(1)}, d_{(2)}, \dots, d_{(p)}$.

Конечно, применяя метод Гаусса к каждой из систем (5.41) независимо от других, можно найти соответствующие решения $x_{(1)}, x_{(2)}, \dots, x_{(p)}$, затратив примерно $(2/3)pt^3$ арифметических операций. Однако при одновременном решении систем (5.41) число операций можно существенно сократить. Как было отмечено выше, основные затраты в методе Гаусса связаны с преобразованием матрицы к треугольному виду. Преобразование же правой части производится параллельно и требует примерно t^2 арифметических операций. Если параллельно с приведением матрицы A к треугольному виду выполнить преобразование всех p правых частей по однотипным формулам, то на прямой ход будет затрачено примерно $(2/3)t^3 + pt^2$ операций. С учетом обратного хода, который в данном случае выполняется p раз, общие вычислительные затраты составят $(2/3)t^3 + 2pt^2$ операций.

2.Вычисление обратной матрицы. Вычисление обратной матрицы является довольно трудоемкой задачей, однако эта задача возникает не так часто, как это можно предполагать. К сожалению, зачастую обращение матрицы A производится с единственной целью вычислить по известному вектору b вектор x вида $x = A^{-1}b$ (т.е. найти решение системы $Ax = b$). Умножение матрицы A^{-1} на вектор b требует примерно $2t^2$ арифметических операций. Однако вычисление A^{-1} обходится (как будет показано ниже) примерно в $2t^3$ операций. Это означает, что на вычисление решения системы $Ax = b$ по формуле $x = A^{-1}b$ будет затрачено примерно $2t^3 + 2t^2$ операций. В

данном случае вектор \mathbf{x} можно найти в 3 раза быстрее методом Гаусса и вычисление обратной матрицы не требуется. Более того, вычисленное методом Гаусса решение окажется точнее, так как потребуется выполнение меньшего числа операций.

Может показаться выгодным предварительное вычисление обратной матрицы \mathbf{A}^{-1} , если далее потребуется найти большое число векторов по формулам

$$\mathbf{x}_{(1)} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{d}_{(1)}, \mathbf{x}_{(2)} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{d}_{(2)}, \dots, \mathbf{x}_{(p)} = \mathbf{A}^{-1} \mathbf{d}_{(p)}. \quad (5.42)$$

Однако суммарные затраты при таком подходе составят примерно $2m^3 + 2pm^2$ операций, в то время как при одновременном решении системы (5.41) методом Гаусса потребуется примерно $(2/3)m^3 + 2pm^2$ операций. Следовательно, и в этом случае вычисление \mathbf{A}^{-1} нецелесообразно.

Довольно часто при решении различных задач средствами линейной алгебры возникают выражения типа

$$\mathbf{v} = \mathbf{B}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{A}^{-1} \mathbf{W} \mathbf{D}^{-1} \mathbf{w}. \quad (5.43)$$

Если у исследователя нет достаточного опыта решения задач линейной алгебры на ЭВМ, то он может принять решение о необходимости вычислять матрицы $\mathbf{B}^{-1}, \mathbf{A}^{-1}, \mathbf{D}^{-1}$ с тем, чтобы действовать далее по формуле (5.43). Однако и в этом случае можно поступить иначе и найти вектор \mathbf{v} с меньшими затратами. Решая систему $\mathbf{D}\mathbf{x} = \mathbf{w}$, найдем $\mathbf{x} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{w}$. Затем вычислим $\mathbf{y} = \mathbf{W}\mathbf{x}$ и, решая систему $\mathbf{A}\mathbf{z} = \mathbf{y}$, найдем $\mathbf{z} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{y}$. Наконец, вычислим $\mathbf{u} = \mathbf{C}\mathbf{z}$ и, решая систему $\mathbf{B}\mathbf{v} = \mathbf{u}$, найдем $\mathbf{v} = \mathbf{B}^{-1}\mathbf{u}$.

Итак, во многих случаях вычисление обратной матрицы не требуется. Однако это вовсе не означает, что нет ситуаций, когда вычисление матрицы \mathbf{A}^{-1} необходимо и оправдано. В ряде технических приложений и статистических задач непосредственный интерес представляет анализ свойств именно обратной матрицы.

Покажем, как вычисление обратной матрицы можно свести к рассмотренной выше задаче решения системы уравнений с несколькими

правыми частями. Обозначим матрицу A^{-1} через V , ее столбцы через v_1, v_2, \dots, v_m и столбцы единичной матрицы через e_1, e_2, \dots, e_m .

Согласно определению обратной матрицы верно равенство $AV = E$, эквивалентное совокупности равенств

$$Av_1 = e_1, Av_2 = e_2, \dots, Av_m = e_m. \quad (5.44)$$

Таким образом, столбцы матрицы $V = A^{-1}$ (а следовательно, и саму матрицу) можно найти, решая m систем уравнений с общей матрицей A . Для этого потребовалось бы примерно $(8/3)m^3$ арифметических операций, однако учет специального вида правых частей системы (5.44) позволяет вычислять матрицу A^{-1} примерно за $2m^3$ операций.

3. Вычисление определителя. Воспользуемся алгоритмом метода Гаусса с выбором главного элемента по столбцу и заметим, что искомый определитель и определитель полученной треугольной матрицы $A^{(m-1)}$ связаны равенством

$$\det A = (-1)^s \det A^{(m-1)},$$

где s - число потребовавшихся перестановок строк. Остается воспользоваться формулой (5.24) и тогда получим

$$\det A = (-1)^s a_{11}^{(0)} a_{22}^{(1)} \dots a_{mm}^{(m-1)}, \quad (5.45)$$

$$\text{где } a_{11}^{(0)} = a_{11}.$$

Рассмотрим далее другие методы решения систем линейных уравнений для других типов матриц.

§ 5.7. Метод Холецкого (метод квадратных корней).

1.Описание метода. Пусть требуется решить систему линейных алгебраических уравнений

$$Ax = b \quad (5.46)$$

с симметричной положительно определенной матрицей A . Линейные системы такого типа часто встречаются в различных приложениях – в задачах оптимизации, при решении уравнений математической физики и т.п. Для их решения применяется *метод Холецкого (метод квадратных корней)*.

В основе метода лежит алгоритм построения специального LU -разложения симметричной положительно определенной матрицы A , в результате чего она приводится к виду

$$A = LL^T. \quad (5.47)$$

В разложении (5.47) нижняя треугольная матрица

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{m1} & l_{m2} & \dots & l_{mm} \end{bmatrix} \quad (5.48)$$

уже не обязательно должна иметь на главной диагонали единицы, как это было в методе Гаусса, а требуется только, чтобы диагональные элементы были положительными.

Если разложение (5.47) получено, то решение системы (5.46) сводится к последовательному решению двух систем с треугольными матрицами:

$$Ly = b, \quad L^Tx = y. \quad (5.49)$$

Для решения систем (5.49) требуется выполнение примерно $2m^2$ арифметических операций.

Найдем элементы матрицы L . Для этого вычислим элементы матрицы LL^T и приравняем их соответствующим элементам матрицы A . В результате получим систему уравнений

$$\begin{aligned}
 l_{11}^2 &= a_{11}, \\
 l_{i1}l_{11} &= a_{i1}, \quad i = 2, 3, \dots, m, \\
 l_{21}^2 + l_{22}^2 &= a_{22}, \\
 l_{i1}l_{21} + l_{i2}l_{22} &= a_{i2}, \quad i = 3, 4, \dots, m, \\
 &\dots\dots\dots \\
 l_{k1}^2 + l_{k2}^2 + \dots + l_{kk}^2 &= a_{kk}, \\
 l_{i1}l_{k1} + l_{i2}l_{k2} + \dots + l_{ik}l_{kk} &= a_{ik}, \quad i = k+1, k+2, \dots, m, \\
 &\dots\dots\dots \\
 l_{m1}^2 + l_{m2}^2 + \dots + l_{mm}^2 &= a_{mm}.
 \end{aligned} \tag{5.50}$$

Решая систему (5.50), последовательно находим

$$\begin{aligned}
 l_{11} &= \sqrt{a_{11}}, \\
 l_{i1} &= a_{i1} / l_{11}, \quad i = 2, 3, \dots, m, \\
 l_{22} &= \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}, \\
 l_{i2} &= (a_{i2} - l_{i1}l_{21}) / l_{22}, \quad i = 3, 4, \dots, m, \\
 &\dots\dots\dots \\
 l_{kk} &= \sqrt{a_{kk} - l_{k1}^2 - l_{k2}^2 - \dots - l_{k,k-1}^2}, \\
 l_{ik} &= (a_{ik} - l_{i1}l_{k1} - l_{i2}l_{k2} - \dots - l_{i,k-1}l_{k,k-1}) / l_{kk}, \quad i = k+1, \dots, m, \\
 &\dots\dots\dots \\
 l_{mm} &= \sqrt{a_{mm} - l_{m1}^2 - l_{m2}^2 - \dots - l_{m,m-1}^2}.
 \end{aligned} \tag{5.51}$$

Заметим, что для вычисления диагональных элементов используется операция извлечения квадратного корня. Поэтому метод Холецкого называют еще и методом квадратных корней. Доказано, что положительность соответствующих подкоренных выражений является следствием положительной определенности матрицы A .

2. Достоинства метода. Метод Холецкого обладает рядом ценных качеств, которые позволяют предпочесть его методу Гаусса, если

требуется решить систему линейных алгебраических уравнений с симметричной и положительно определенной матрицей.

Как нетрудно подсчитать, число операций, выполняемых в ходе вычисления разложения (5.47) по формулам (5.51), равно примерно $t^3/3$. Учитывая, что для решения систем (5.49) требуется примерно $2t^2$ арифметических операций, убеждаемся, что при больших t метод Холецкого требует вдвое меньше вычислительных затрат по сравнению с методом Гаусса.

Безусловным достоинством метода Холецкого является также его гарантированная устойчивость.

§ 5.8. Метод прогонки

Рассмотрим *метод прогонки* – простой и эффективный алгоритм решения систем линейных алгебраических уравнений с трехдиагональными матрицами:

$$\begin{array}{rcl}
 b_1x_1 + c_1x_2 & & = d_1, \\
 a_2x_1 + b_2x_2 + c_2x_3 & & = d_2, \\
 & \dots\dots\dots & \\
 a_ix_{i-1} + b_ix_i + c_ix_{i+1} & & = d_i, \quad (5.52) \\
 & \dots\dots\dots & \\
 a_{m-1}x_{m-2} + b_{m-1}x_{m-1} + c_{m-1}x_m & & = d_{m-1}, \\
 a_mx_{m-1} + b_mx_m & & = d_m.
 \end{array}$$

Системы такого вида часто возникают при решении различных задач математической физики, а также при решении других вычислительных задач (например, приближения функций сплайнами).

1. Вывод расчетных формул. Преобразуем первое уравнение системы (5.52) к виду

$$x_1 = \alpha_1x_2 + \beta_1, \quad \text{где } \alpha_1 = -c_1/b_1, \quad \beta_1 = d_1/b_1. \quad (5.53)$$

Подставим полученное для x_1 выражение во второе уравнение системы:

$$a_2(\alpha_1x_2 + \beta_1) + b_2x_2 + c_2x_3 = d_2.$$

Преобразуем это уравнение к виду

$$x_2 = \alpha_2 x_3 + \beta_2, \quad (5.54)$$

где $\alpha_2 = -c_2 / (b_2 + a_2 \alpha_1)$, $\beta_2 = (d_2 - a_2 \beta_1) / (b_2 + a_2 \alpha_1)$.

Выражение (5.54) подставляем в третье уравнение системы и т.д.

На i -м шаге этого процесса ($1 < i < m$) i -е уравнение системы преобразуется к виду

$$x_i = \alpha_i x_{i+1} + \beta_i, \quad (5.55)$$

где $\alpha_i = -c_i / (b_i + a_i \alpha_{i-1})$, $\beta_i = (d_i - a_i \beta_{i-1}) / (b_i + a_i \alpha_{i-1})$.

На m -м шаге подстановка в последнее уравнение выражения $x_{m-1} = \alpha_{m-1} x_m + \beta_{m-1}$ дает

$$a_m (\alpha_{m-1} x_m + \beta_{m-1}) + b_m x_m = d_m.$$

Отсюда можно определить значение x_m :

$$x_m = \beta_m = (d_m - a_m \beta_{m-1}) / (b_m + a_m \alpha_{m-1}).$$

Значения остальных неизвестных x_i для $i = m-1, m-2, \dots, 1$ теперь легко вычисляются по формуле (5.55).

2. Алгоритм прогонки. Сделанные преобразования позволяют организовать вычисления метода прогонки в два этапа.

Прямой ход метода прогонки (*прямая прогонка*) состоит в вычислении *прогоночных коэффициентов*

$$\alpha_i \ (1 \leq i < m) \text{ и } \beta_i \ (1 \leq i \leq m).$$

При $i = 1$ коэффициенты вычисляются по формулам

$$\alpha_1 = -c_1 / \gamma_1, \quad \beta_1 = d_1 / \gamma_1, \quad \gamma_1 = b_1, \quad (5.56)$$

а при $i = 2, 3, \dots, m-1$ – по рекуррентным формулам

$$\alpha_i = -c_i / \gamma_i, \quad \beta_i = (d_i - a_i \beta_{i-1}) / \gamma_i, \quad \gamma_i = b_i + a_i \alpha_{i-1}. \quad (5.57)$$

При $i = m$ прямая прогонка завершается вычислением

$$\beta_m = (d_m - a_m \beta_{m-1}) / \gamma_m, \quad \gamma_m = b_m + a_m \alpha_{m-1}. \quad (5.58)$$

Обратный ход метода прогонки (*обратная прогонка*) дает значения неизвестных. Сначала полагают $x_m = \beta_m$. Затем значения остальных неизвестных вычисляют по формуле

$$x_i = \alpha_i x_{i+1} + \beta_i, \quad i = m-1, m-2, \dots, 1. \quad (5.59)$$

Вычисления ведут в порядке убывания значений i от $m-1$ до 1.

3. Свойства метода прогонки. Непосредственный подсчет показывает, что для реализации вычислений по формулам (5.56) – (5.59) для систем уравнений с трехдиагональной матрицей требуется примерно $8m$ арифметических операций, тогда как в методе Гаусса (для систем с заполненной матрицей) это число составляет примерно $(2/3)m^3$.

Приведем достаточные условия на коэффициенты системы (5.52), при выполнении которых вычисления по формулам прямой прогонки могут быть доведены до конца (ни один из знаменателей γ_i не обратится в нуль). В частности, это гарантирует существование и единственность решения (5.52). При выполнении тех же условий коэффициенты α_i при всех i удовлетворяют неравенству $|\alpha_i| \leq 1$, а следовательно, обратная прогонка по формуле (5.59) устойчива по входным данным.

Т е о р е м а 5.2. Пусть коэффициенты системы (5.52) удовлетворяют следующим условиям диагонального преобладания:

$$|b_k| \geq |a_k| + |c_k|, \quad |b_k| > |a_k| \quad (1 \leq k \leq m). \quad (5.60)$$

Тогда $\gamma_i \neq 0$ и $|\alpha_i| \leq 1$ для всех $i = 1, 2, \dots, m$.

□ Теорема доказывается методом математической индукции ■