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

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{d}_{(1)}, \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{d}_{(2)}, \dots , \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{d}_{(p)} \tag{5.41}$$

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

Конечно, применяя метод Гаусса к каждой из систем (5.41) независимо от других, можно найти соответствующие решения $\boldsymbol{x}_{(1)}$, $\boldsymbol{x}_{(2)}$, $\dots$,$\boldsymbol{x}_{(p)}$, затратив примерно (2/3)pm^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 m^2 арифметических операций. Если параллельно с приведением матрицы $\boldsymbol{A}$ к треугольному виду выполнить преобразование всех p правых частей по однотипным формулам, то на прямой ход будет затрачено примерно (2/3)m^3 + pm^2 операций. С учетом обратного хода, который в данном случае выполняется p раз, общие вычислительные затраты составят (2/3)m^3 + 2pm^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 $\boldsymbol{A}$ производится с единственной целью вычислить по известному вектору $\boldsymbol{b}$ вектор $\boldsymbol{x}$ вида $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ (т.е. найти решение системы $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$). Умножение матрицы $\boldsymbol{A}^{-1}$ на вектор $\boldsymbol{b}$ требует примерно $2m^2$ арифметических операций. Однако вычисление $\boldsymbol{A}^{-1}$ обходится (как будет показано ниже) примерно в $2m^3$ операций. Это означает, что на вычисление решения системы $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ по формуле $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ будет затрачено примерно $2m^3 + 2m^2$ операций. В данном случае вектор $\boldsymbol{x}$ 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 $\boldsymbol{A^{-1}}$, если далее потребуется найти большое число векторов по формулам

$$\boldsymbol{x_{(1)}} = \boldsymbol{A^{-1}}\, \boldsymbol{d_{(1)}},\ \boldsymbol{x_{(2)}} = \boldsymbol{A^{-1}}\, \boldsymbol{d_{(2)}}, \ldots, \boldsymbol{x_{(p)}} = \boldsymbol{A^{-1}}\, \boldsymbol{d_{(p)}}. \qquad (5.42)$$

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 $\boldsymbol{A^{-1}}$ нецелесообразно.

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

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{B^{-1}CA^{-1}WD^{-1}w}\,. \qquad (5.43)$$

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

Итак, во многих случаях вычисление обратной матрицы не требуется. Однако это вовсе не означает, что нет ситуаций, когда вычисление матрицы $\boldsymbol{A^{-1}}$ 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 $\boldsymbol{A}^{-1}$ через $\boldsymbol{V}$, ее столбцы через $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \ldots \boldsymbol{v}_m$ и столбцы единичной матрицы через $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \ldots \boldsymbol{e}_m$.

Согласно определению обратной матрицы верно равенство $\boldsymbol{AV} = \boldsymbol{E}$, эквивалентное совокупности равенств

$$\boldsymbol{Av}_1 = \boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{Av}_2 = \boldsymbol{e}_2, \ldots, \boldsymbol{Av}_m = \boldsymbol{e}_m. \tag{5.44}$$

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

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

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

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

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

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \qquad (5.46)$$

С симметричной положительно определенной матрицей $\boldsymbol{A}$. Линейные системы такого типа часто встречаются 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 $\boldsymbol{LU}$-разложения матрицы $\boldsymbol{A}$, в результате чего она приводится к виду

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LL}^{\mathrm{T}}. \qquad (5.47)$$

В разложении (5.47) нижняя треугольная матрица

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

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:

$$\boldsymbol{Ly} = \boldsymbol{b}, \quad \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}. \qquad (5.49)$$

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

Найдем элементы матрицы $\boldsymbol{L}$. Для этого вычислим элементы матрицы $\boldsymbol{LL}^{\mathrm{T}}$ и приравняем их соответствующим элементам матрицы $\boldsymbol{A}$. В результате получим систему уравнений

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

Решая систему (5.50), последовательно находим

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

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

$m^3/3$. Учитывая, что для решения систем (5.49) требуется примерно $2m^2$ арифметических операций, убеждаемся, что при больших m 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:

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

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

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

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

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

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

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

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, …, 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*

α_i $(1 \le i < m)$ и β_i $(1 \le i \le m)$.

При $i = 1$ коэффициенты вычисляются по формулам

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

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

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

При $i = m$ прямая прогонка завершается вычислением

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

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

$$x_i = \alpha_i x_{i+1} + \beta_i,\quad i = m-1, m-2, \ldots, 1. \tag{5.59}$$

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 8 m 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 $|\alpha_i| \le 1$, 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:*

$$|b_k| \ge |a_k| + |c_k|,\quad |b_k| > |a_k| \quad (1 \le k \le m). \tag{5.60}$$

Тогда $\gamma_i \neq 0$ *и* $|\alpha_i| \le 1$ *для всех* $i = 1, 2, \ldots, m$.

□ Теорема доказывается методом математической индукции ■