2.2 Розв'язання СЛАР прямими методами. Метод квадратних коренів (метод Холецького)

Метод квадратних коренів (відноситься до категорії точних чисельних методів) використовується для знаходження розв'язку систем лінійних алгебраїчних рівнянь з симетричною матрицею коефіцієнтів при невідомих, тобто для систем вигляду

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

де $a_{ij} = a_{ji}$ $\left(i = \overline{1,n},\ j = \overline{1,n}\right)$.

Нехай A – симетрична квадратна матриця системи $Ax = B$ порядку n. Розв'яжемо задачу її подання у вигляді

$$A = U^T \cdot U,$$

де

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix},\ U^T = \begin{pmatrix} u_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ u_{12} & u_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1n} & u_{2n} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

Знаходячи добуток $U^T \cdot U$, складемо систему рівнянь відносно невідомих елементів матриці U:

$$\begin{pmatrix} u_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ u_{12} & u_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_{1n} & u_{2n} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}.$$

Система має наступний вигляд:

$$\begin{cases} u_{11}^2 = a_{11}, \quad u_{11} \cdot u_{12} = a_{12}, \quad \ldots, \quad u_{11} \cdot u_{1n} = a_{1n}; \\ u_{12}^2 + u_{22}^2 = a_{22}, \quad \ldots, \quad u_{12} \cdot u_{1n} + u_{22} \cdot u_{2n} = a_{2n}; \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ u_{1n}^2 + u_{2n}^2 + \ldots + u_{nn}^2 = a_{nn}. \end{cases}$$

З першого рядка системи знаходимо

$$u_{11} = \sqrt{a_{11}}, \qquad u_{1j} = \frac{a_{1j}}{u_{11}} \quad j = 2, 3, \ldots, n.$$

З другого рядка визначаємо

$$u_{22} = \sqrt{a_{22} - u_{12}^2}, \qquad u_{2j} = \frac{a_{2j} - u_{12} \cdot u_{1j}}{u_{22}}, \quad j = 3, 4, \ldots, n$$ і т.д.

З останнього рядка маємо

$$u_{nn} = \sqrt{a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} u_{kn}^2}.$$

Таким чином, елементи матриці U знаходять із співвідношень

$$u_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{n-1} u_{ki}^2}, \quad i = 1, 2, \ldots, n;$$
$$u_{ij} = \frac{1}{u_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k-1}^{i-1} u_{ki} u_{kj} \right), \quad j = 2, 3, \ldots, n;\ j > i; \quad u_{ij} = 0\ (j < i). \tag{2}$$

Якщо матрицю A можна подати у вигляді $U^T \cdot U$, то система $Ax = B$ має вигляд $U^T \cdot U\,x = B$. Розв'язання цієї системи зводиться до послідовного розв'язання двох систем з трикутними матрицями. Тобто, процес відшукання розв'язку за даним методом складається з двох етапів.

1. *Прямий хід*. Добуток $U\,x$ позначається через y. В результаті розв'язання системи $U^T \cdot y = B$ знаходять стовпець y.
2. *Обернений хід*. В результаті розв'язання системи $U\,x = y$ знаходять розв'язок задачі – стовпець x.

Алгоритм методу квадратних коренів

1. Подати матрицю A у вигляді $A = U^T \cdot U$ використовуючи формули (2).
2. Скласти систему рівнянь $U^T \cdot y = B$ та знайти y.
3. Скласти систему рівнянь $U\,x = y$ та знайти x.

Зауваження. Метод квадратних коренів більш зручний і економічний у порівнянні з методом Гаусса, він легко програмується та потребує вдвічі менше арифметичних операцій. Також слід зазначити, що метод квадратних коренів можна також використовувати і для знаходження визначника матриці. Для цього використовують наступну формулу $\det(A) = \left(u_{11} \cdot u_{22} \cdot \ldots \cdot u_{nn}\right)^2$.

Приклад. Знайти розв'язок системи рівнянь методом квадратних коренів

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 + 4x_3 = 16, \\ x_1 + x_2 + 3x_3 = 12, \\ 4x_1 + 3x_2 + 14x_3 = 52. \end{cases}$$

Розв'язання. 1. Подамо матрицю A у вигляді $A = U^T \cdot U$ використовуючи формули (2).

При $i = 1$ отримуємо

$$u_{11}=\sqrt{a_{11}}=\sqrt{2},\ u_{12}=\frac{a_{12}}{u_{11}}=\frac{1}{\sqrt{2}};\ u_{13}=\frac{a_{13}}{u_{11}}=\frac{4}{\sqrt{2}}$$

При $i=2$ маємо

$$u_{22}=\sqrt{a_{22}-\sum_{k=1}^{1}u_{k2}^2}=\sqrt{a_{22}-u_{12}^2}=\sqrt{1-\frac{1}{2}}=\frac{1}{\sqrt{2}},$$

$$u_{23}=\frac{1}{u_{22}}\left(a_{23}-\sum_{k=1}^{1}u_{k2}u_{k3}\right)=\frac{3-\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\frac{4}{\sqrt{2}}}{\frac{1}{\sqrt{2}}}=\sqrt{2}.$$

При $i=3$ маємо

$$u_{33}=\sqrt{a_{33}-\sum_{k=1}^{2}u_{k3}^2}=\sqrt{a_{33}-u_{13}^2-u_{23}^2}=\sqrt{14-8-2}=2.$$

Таким чином, отримали

$$U=\begin{pmatrix}\sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{4}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix},\qquad U^T=\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 0 & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{4}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} & 2\end{pmatrix}.$$

2. Розв'яжемо систему рівнянь $U^T\cdot y=B$.

$$\begin{pmatrix}\sqrt{2} & 0 & 0\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{4}{\sqrt{2}} & \sqrt{2} & 2\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}y_1\\ y_2\\ y_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}16\\ 12\\ 52\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{cases}\sqrt{2}y_1=16,\\ \frac{1}{\sqrt{2}}y_1+\frac{1}{\sqrt{2}}y_2=12,\\ \frac{4}{\sqrt{2}}y_1+\sqrt{2}y_2+2y_3=52.\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}y_1=\frac{16}{\sqrt{2}}=8\sqrt{2},\\ y_2=12\sqrt{2}-y_1=4\sqrt{2},\\ y_3=\frac{52-32-8}{2}=6.\end{cases}$$

3. Розв'яжемо систему рівнянь $U\,x=y$.

$$\begin{pmatrix}\sqrt{2} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{4}{\sqrt{2}}\\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \sqrt{2}\\ 0 & 0 & 2\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}8\sqrt{2}\\ 4\sqrt{2}\\ 6\end{pmatrix}\Rightarrow\begin{cases}\sqrt{2}x_1+\frac{x_2}{\sqrt{2}}+\frac{4x_3}{\sqrt{2}}=8\sqrt{2},\\ \frac{x_2}{\sqrt{2}}+\sqrt{2}x_3=4\sqrt{2},\\ 2x_3=6.\end{cases}\Rightarrow\begin{cases}x_1=\frac{16-12-2}{2}=1,\\ x_2=8-2x_3=2,\\ x_3=3.\end{cases}$$

Таким чином, розв'язок даної системи рівнянь має вигляд $x_1=1,\ x_2=2,\ x_3=3$.

Зауваження 1. У формулах методу присутня операція квадратного кореня . Метод працює, навіть якщо під коренем будуть від'ємні вирази. Тоді серед u_{ij}

з’являється чисто уявні значення. Програмування методу вимагає реалізації комплексних чисел.

Зауваження 2. Якщо під коренем буде нуль, то $u_{ii} = 0$ і метод не працює (ділення на нуль). Це означає, що не будь-яку симетричну матрицю можна представити у вигляді добутку $U^T \cdot U$.

Зауваження 1 приводить до модифікації методу квадратного кореня, яка не вимагає комплекснозначної реалізації.

Варіант 2. Матрицю $\boldsymbol{A}$ представляють у вигляді $\boldsymbol{A = LDL^*}$, де $\boldsymbol{L}$ – нижня трикутна матриця, $\boldsymbol{D}$ – діагональна матриця, причому $d_{ii} = \pm 1$, у залежності від знаку виразу під коренем. Формули методу:

$$\left\{ \begin{aligned} & d_k = sign\left(a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i\, l_{ki}^2 \right); \qquad l_{kk} = d_k \sqrt{\left| a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i\, l_{ki}^2 \right|}; \\ & l_{jk} = \left(a_{jk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i\, l_{ki} l_{ji} \right) \Big/ d_k l_{kk}, \quad j = k+1, \ldots, n; \end{aligned} \right\} \quad k = 1, \ldots, n.$$

Метод працює у множині дійсних чисел незалежно від знаків діагональних елементів. Якщо деяке $l_{kk} = 0,\ k<n$, то представлення $\boldsymbol{A = LDL^*}$ є нездійсненним.

Тоді, вводячи позначення $L^*x = z$, $Dz = y$, $Ly = f$, маємо

$$y_k = \left(f_k - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} y_i \right) \Big/ l_{kk}, \quad k = 1, 2, \ldots, n;$$

$$z_k = y_k / d_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n;$$

$$x_k = \left(z_k - \sum_{i=k+1}^{n} l_{ik} x_i \right) \Big/ l_{kk}, \quad k = n, n-1, \ldots, 2, 1.$$

Варіант 3. Матрицю $\boldsymbol{A}$ представляють у вигляді $\boldsymbol{A = LDL^*}$, де $\boldsymbol{L}$ – нижня трикутна матриця з **одиницями** на головній діагоналі, $\boldsymbol{D}$ - діагональна матриця. При цьому виявляється, що d_{ii} стає рівним отому виразу, від'ємність якого була критичною у варіанті 1. Формули методу:

$$\left\{ \begin{aligned} & d_k = a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i\, l_{ki}^2; \qquad l_{kk} = 1; \\ & l_{jk} = \left(a_{jk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i\, l_{ki} l_{ji} \right) \Big/ d_k, \quad j = k+1, \ldots, n; \end{aligned} \right\} \quad k = 1, \ldots, n.$$

Метод працює у множині дійсних чисел незалежно від знаків діагональних елементів і, на відміну від попереднього варіанту, не вимагає використання функції кореня квадратного. Умова $l_{kk} = 0,\ k<n$, залишається критичною.

Узагальнення для несиметричної матриці.

У багатьох задачах, зокрема при обчисленні власних чисел та векторів вимагається представлення матриці у вигляді ***A = LDU***, де ***L*** та ***U*** – нижня та верхня трикутні матриці з одиницями на головній діагоналі; ***D*** – діагональна матриця.

Нехай

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}; \quad D = \begin{bmatrix} d_1 & & & 0 \\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_n \end{bmatrix};$$

$$L = \begin{bmatrix} 1 & m_{12} & m_{13} & \cdots & m_{1n} \\ 0 & 1 & m_{23} & \cdots & m_{2n} \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & m_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

Тоді, перемноживши ці три матриці та прирівнявши результат до елементів матриці А, остаточно одержуємо алгоритм:

У циклі для k = 1, …, n

$$d_k = a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i l_{ki} m_{ik}; \qquad l_{kk} = 1; \quad m_{kk} = 1;$$

У циклі для j = k+1, …, n

$$l_{jk} = \left(a_{jk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i l_{ji} m_{ik} \right) \Big/ d_k;$$

$$m_{kj} = \left(a_{kj} - \sum_{i=1}^{k-1} d_i l_{ki} m_{ij} \right) \Big/ d_k;$$

кінець циклу по j;

кінець циклу по k;

Тоді, вважаючи у системі $Ax = LDUx = f \quad Ux = z, \quad Dz = y, \quad Ly = f$, маємо

$$y_k = f_k - \sum_{i=1}^{k-1} l_{ki} y_i, \quad k = 1, 2, \ldots, n;$$

$$z_k = y_k / d_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n;$$

$$x_k = z_k - \sum_{i=k+1}^{n} m_{ki} x_i, \quad k = n, n-1, \ldots, 2, 1.$$