2 МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗАННЯ СИСТЕМ ЛІНІЙНИХ АЛГЕБРАЇЧНИХ РІВНЯНЬ (СЛАР)

2.1 Класифікація методів. Розв'язання СЛАР прямими методами. Метод Гауса

2.1.1 Класифікація методів

Розглянемо чисельні методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь

$$Ax=f, \tag{2.1}$$

де A – *матриця* $m \times m$, $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)^T$ – шуканий вектор, $f = (f_1, f_2, \dots, f_m)^T$ – заданий вектор, T – операція транспонування.

Припускаємо, що $f \neq \overline{0}$, та визначник матриці A відмінний від нуля, так що існує єдиний розв'язок x. З курсу алгебри відомо, що систему (2.1) можна розв'язати за формулами Крамера*. Для великих m цей спосіб практично неприйнятний, оскільки потребує порядку $m!$ арифметичних дій, тому широко використовуються інші методи розв'язання, наприклад, метод Гауса**, який потребує $\approx \frac{2}{3}m^3$ дій.

Методи чисельного розв'язання системи (2.1) поділяють на дві групи:

– прямі методи;

– ітераційні методи.

У *прямих* (або точних) методів розв'язок x системи (2.1) знаходять за скінченну кількість арифметичних дій. Внаслідок похибок округлення прямі методи насправді не зумовлюють точний розв'язок системи (2.1) і назвати їх точними можливо, лише залишаючи осторонь похибки округлень.

До методів першої групи належать метод Гауса (метод виключення), метод квадратного кореня (розклад Холецького), метод ортогоналізації, метод прогонки та різноманітні модифікації згаданих методів.

Ітераційні методи (їх також називають методами *послідовних наближень)* характеризуються тим, що з самого початку задають якісь наближені значення невідомих. З цих наближених значень тим чи іншим чином отримують нові, більш точні наближені значення і т.д. При виконанні певних умов на деякому кроці ми отримуємо розв'язок системи з певною точністю.

2.1.2 Метод Гауса

Цей метод є одним з найпоширеніших методів розв'язання СЛАР. У його основі лежить ідея послідовного виключення невідомих, що приводить вихідну систему до трикутного виду, у якому всі коефіцієнти нижче головної діагоналі дорівнюють нулю. Існують різні обчислювальні схеми, що реалізують цей метод.

---

* Крамер Габрієль (1704-1752)- швейцарський математик

** Гаус Карл Фрідріх (1777-1855)- німецький математик, астроном, фізик, геодезист, професор Геттінгенського університету.

Запишемо систему (2.1) у розгорнутому вигляді:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \ldots + a_{1m}x_m = f_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \ldots + a_{2m}x_m = f_2 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \ldots + a_{mm}x_m = f_m \end{cases} . \tag{2.2}$$

Метод Гауса розв’язання системи (2.2) полягає у послідовному вилученні невідомих $x_1, x_2, \ldots, x_{m-1}$ з цієї системи.

Припустимо, що $a_{11} \neq 0$. Поділивши перше рівняння на a_{11}, одержимо

$$x_1 + c_{12}x_2 + \ldots + c_{1m}\, x_m = y_1 , \tag{2.3}$$

де $c_{1j} = a_{1j} / a_{11}$; $j = \overline{2,m}$; $y_1 = f_1/a_{11}$.

Розглянемо тепер рівняння системи (2.2), що залишилися

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + \ldots + a_{im}x_m = f_i \;;\quad i = \overline{2,m}. \tag{2.4}$$

Помножимо (2.3) на a_{i1} та віднімемо одержане рівняння з i-го рівняння системи (2.4), $i = \overline{2,m}$.

У результаті одержимо таку систему рівнянь:

$$\begin{array}{rcl} x_1 + \quad c_{12}x_2 + \ldots + c_{1j}x_j + \ldots + c_{1m}x_m & = & y_1, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{2j}^{(1)}x_j + \ldots + a_{2m}^{(1)}x_m & = & f_2^{(1)}, \\ \ldots & & \\ a_{m2}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{mj}^{(1)}x_j + \ldots + a_{mm}^{(1)}x_m & = & f_m^{(1)}. \end{array} \tag{2.5}$$

Тут позначено:

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - c_{1j}a_{i1}; \qquad f_i^{(1)} = f_i - y_1 a_{i1}; \quad i, j = \overline{2,m}. \tag{2.6}$$

Матриця системи (2.5) має вигляд:

$$\begin{pmatrix} 1 & c_{12} & \ldots & c_{1m} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \ldots & a_{2m}^{(1)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & a_{m2}^{(1)} & \ldots & a_{mm}^{(1)} \end{pmatrix}.$$

У системі (2.5) невідоме x міститься тільки в першому рівнянні, тому надалі достатньо мати справу із скороченою системою рівнянь:

$$\begin{array}{l} a_{22}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{2j}^{(1)}x_j + \ldots + a_{2m}^{(1)}x_m = f_2^{(1)}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{m2}^{(1)}x_2 + \ldots + a_{mj}^{(1)}x_j + \ldots + a_{mm}^{(1)}x_m = f_m^{(1)}. \end{array} \tag{2.7}$$

Тим самим здійснили перший крок методу Гауса .

Коли $a_{22}^{(1)} \neq 0$, то з системи (2.7) аналогічно можна вилучити невідоме x_2, і перейти до системи, еквівалентної (2.2), що має матрицю такої структури:

$$\begin{pmatrix} 1 & \times & \times & \dots & \times \\ 0 & 1 & \times & \dots & \times \\ 0 & 0 & \times & \dots & \times \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \times & \dots & \times \end{pmatrix}.$$

При цьому перше рівняння системи (2.5) залишається без зміни. Так само вилучаючи невідомі $x_3, x_4, \dots, x_{m-1}$, отримаємо систему рівнянь такого вигляду:

$$\begin{aligned} x_1 + c_{1,2}x_2 + \dots + c_{1,m-1}x_{m-1} + c_{1,m}x_m &= y_1, \\ x_2 + \dots + c_{2,m-1}x_{m-1} + c_{2,m}x_m &= y_2, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ x_{m-1} + c_{m-1,m}x_m &= y_{m-1}, \\ x_m &= y_m, \end{aligned} \tag{2.8}$$

що еквівалентна початковій системі (2.2) .

Матриця цієї системи

$$C = \begin{pmatrix} 1 & c_{12} & \dots & c_{1,m-1} & c_{1m} \\ 0 & 1 & \dots & c_{2,m-1} & c_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & c_{m-1,m} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.9}$$

містить нулі всюди нижче від головної діагоналі. Матриці такого виду називають *верхніми трикутними* матрицями.

Нижньою трикутною матрицею називають таку матрицю, у якої дорівнюють нулю всі елементи, що містяться вище від головної діагоналі.

Побудова системи (2.8) складає *прямий хід* методу Гауса. *Зворотний хід* полягає у знаходженні невідомих $x_1, \dots, x_m$ з системи (2.8). Так як матриця системи має трикутний вигляд, можна послідовно, починаючи з x_m, відшукати всі невідомі. Дійсно, $x_m = y_m$, $x_{m-1} = y_{m-1} - c_{m-1,m}x_m$ і т.д.

Загальні формули зворотного ходу мають вигляд:

$$x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{m} c_{ij}x_j; \quad i = \overline{m-1,1}; \quad x_m = y_m. \tag{2.10}$$

При реалізації на ЕОМ прямого ходу методу Гауса немає необхідності діяти із змінними $x_1, x_2, \dots, x_m$. Досить зазначити алгоритм, за яким початкова матриця A перетворюється до трикутного вигляду (2.9), та зазначити відповідне перетворення правих частин системи.

Одержимо ці загальні формули.

Нехай вже здійснені перші k-1 кроків, тобто вже вилучені змінні $x_1, x_2, \dots, x_{k-1}$.

Тоді маємо систему:

$$
\begin{aligned}
x_1 + c_{12}x_2 + \ldots + c_{1,k-1}x_{k-1} + c_{1k}x_k + \ldots + c_{1m}x_m &= y_1 \\
x_2 + \ldots + c_{2,k-1}x_{k-1} + c_{2k}x_k + \ldots + c_{2m}x_m &= y_2 \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \\
x_{k-1} + c_{k-1,k}x_k + \ldots + c_{k-1,m}x_m &= y_{k-1} \\
a_{kk}^{(k-1)}x_k + \ldots + a_{km}^{(k-1)}x_m &= f_k^{(k-1)} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \\
a_{mk}^{(k-1)}x_k + \ldots + a_{mm}^{(k-1)}x_m &= f_m^{(k-1)}
\end{aligned}
\qquad (2.11)
$$

Розглянемо k-те рівняння цієї системи:

$$a_{kk}^{(k-1)}x_k + \ldots + a_{km}^{(k-1)}x_m = f_k^{(k-1)}$$

та припустимо, що $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$.

Поділивши обидві частини цього рівняння на $a_{kk}^{(k-1)}$, одержимо

$$x_k + c_{k,k+1}x_{k+1} + \ldots + c_{km}x_m = y_k \qquad (2.12)$$

де $c_{kj} = a_{kj}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}; \quad j = \overline{k+1,m}; \quad y_k = f_k^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}$.

Далі помножимо рівняння (2.12) на $a_{ik}^{(k-1)}$ та віднімемо одержане співвідношення з i-го $(i > \mathrm{k})$ рівняння системи (2.11). У результаті остання група рівнянь системи (2.11) набуває наступного вигляду:

$$
\begin{aligned}
x_k + c_{k,k+1}x_{k+1} + \ldots + c_{km}x_m &= y_k \\
a_{k+1,k+1}^{(k)}x_{k+1} + \ldots + a_{k+1,m}^{(k)}x_m &= f_{k+1}^{(k)} \\
\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots & \\
a_{m,k+1}^{(k)}x_{k+1} + \ldots + a_{mm}^{(k)}x_m &= f_m^{(k)}
\end{aligned}
$$

де $a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{jk}^{(k-1)}c_{kj}; \quad i,j = \overline{k+1,m}; \quad f_i^{(k)} = f_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}y_k; \; i = \overline{k+1,m}$.

Отже, у прямому ході методу Гауса коефіцієнти рівнянь перетворюються за наступним ***правилом***

$$a_{kj}^{(0)} = a_{kj}; \;\; k,j = \overline{1,m};$$

$$c_{kj} = a_{kj}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}; \;\; j = \overline{k+1,m}; \;\; k = \overline{1,m}; \qquad (2.13)$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{jk}^{(k-1)}c_{kj}; \;\; i,j = \overline{k+1,m}; \;\; k = \overline{1,m-1}. \qquad (2.14)$$

Обчислення правих частин системи (2.8) здійснюється за формулами:

$$f_k^{(0)} = f_k; \; y_k = f_k^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}; \;\; k = \overline{1,m}; \qquad (2.15)$$

$$f_i^{(k)} = f_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}y_k; \quad i = \overline{k+1,m}. \qquad (2.16)$$

Коефіцієнти c_{ij} і праві частини y_i ; $i = \overline{1,m}$; $j = \overline{i+1,m}$ зберігаються у пам’яті ЕОМ і використовуються при здійсненні зворотного ходу за формулами (2.10).

Основним обмеженням методу є припущення, що всі елементи $a_{kk}^{(k-1)}$, на які здійснюється ділення, відрізняються від нуля. Число $a_{kk}^{(k-1)}$ називається *провідним елементом* на k-му кроці вилучення. Навіть, якщо деякий провідний елемент не дорівнює нулеві, а просто є близьким до нуля, у процесі обчислень відбувається нагромадження похибок. Вихід з цієї ситуації полягає в тому, що як провідний елемент вибирається не $a_{kk}^{(k-1)}$, а інше число (тобто на k-му кроці вилучається не x_k, а інша змінна x_j, $j \neq k$) . Така стратегія вибору провідних елементів здійснюється в методі Гауса з вибором головного елемента, який буде розглянуто далі.

2.1.3 Умови застосування методу Гауса

Вище було показано, що метод Гауса перетворює вихідну систему рівнянь

$$Ax = f \tag{2.17}$$

до еквівалентної системи

$$Cx = y, \tag{2.18}$$

де C – верхня трикутна матриця з одиницями на головній діагоналі. З'ясуємо тепер, як зв'язані між собою вектори правих частин f та y. З формул (2.16) послідовно отримуємо:

$$f_1 = a_{11}y_1$$
$$f_2 = a_{21}y_1 + a_{22}^{(1)}y_2$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots\dots$$
$$f_j = b_{j1}y_1 + b_{j2}y_2 + \dots + b_{jj}y_j, \quad j = \overline{1,m}\ , \tag{2.19}$$

де b_{ji} – числові коефіцієнти, причому $b_{jj} = a_{jj}^{(j-1)}$.

Співвідношення (2.19) можна записати у матричному вигляді

$$f = By\ , \tag{2.20}$$

де B – нижня трикутна матриця з елементами $a_{jj}^{(j-1)}$, $j = \overline{1,m}$ $(a_{11}^{(0)} = a_{11})$ на головній діагоналі.

Нагадаємо, що головне припущення при формулюванні методу Гауса полягало у тому, що всі $a_{jj}^{(j-1)} \neq 0$. Тому, на діагоналі матриці B стоять ненульові елементи, $|B| = \prod_{j=1}^{m} a_{jj}^{(j-1)} \neq 0$, тобто B має обернену матрицю, а $y = B^{-1}f$.

Підставляючи вираз для y у (2.18), приходимо до рівняння

$$Cx = B^{-1}f,$$

звідки

$$BCx = f\ . \tag{2.21}$$

Порівнюючи (2.21) з рівнянням (2.17), приходимо до ***висновку***, що як наслідок застосування методу Гауса одержано розклад вихідної матриці A у добуток $A=BC$, де B – нижня трикутна матриця з ненульовими елементами на головній діагоналі, C – верхня трикутна матриця з одиничною головною діагоналлю.

Отже, метод Гауса можна тлумачити наступним чином. Нехай задано матрицю A і вектор f. Спочатку утворюється розклад A у добуток двох трикутних матриць $A = B \cdot C$. Далі послідовно розв'язуються дві системи рівнянь

$$By = f \tag{2.22}$$

$$Cx = y \tag{2.23}$$

з трикутними матрицями, звідки і одержується шуканий вектор x. Розклад $A=BC$ відповідає прямому ходу методу Гауса, а розв'язок системи (2.22)-(2.23) – зворотному ходу. Зауважимо, що у вищенаведеному алгоритмі розклад $A=BC$ та розв'язок системи (2.22) здійснюють одночасно.

З вищезазначеного можна зробити ***висновок***. Оскільки

$$|A| = |B| \cdot |C| = \prod_{j=1}^{m} a_{jj}^{(j-1)},$$

то метод Гауса дає змогу одночасно з розв'язком системи (2.17) обчислити <u>визначник матриці</u> A простим множенням ведучих елементів. Якщо ж завданням є просто обчислення визначника матриці, то це можна зробити за допомогою методу Гауса, при цьому немає потреби обчислювати праві частини перетворюваних рівнянь.

Метод обчислення визначника матриці, що базується на алгоритмі прямого ходу методу Гауса, використовує властивість визначника трикутної матриці. Для такої матриці визначник дорівнює добутку елементів головної діагоналі.

Далі, додержуючись стандартних позначень, нижні трикутні матриці будемо позначати L (від англійського lower – нижній), та верхні трикутні – літерою U (від англійського upper – верхній).

Позначимо через Δ_j – кутовий мінор порядку j матриці A, тобто

$$\Delta_1 = a_{11}; \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}; \ \cdots; \quad \Delta_m = |\mathrm{A}| \ .$$

Теоретичне обґрунтування можливості розкладу матриці у добуток двох трикутних матриць містить наступна теорема.

<u>**Теорема про *LU*- розклад**</u>. Нехай усі кутові мінори матриці A відмінні від нуля, $\Delta_j \neq 0, \ j = \overline{1,m}$. Тоді матрицю A можна подати однозначно у вигляді добутку

$$A=LU, \tag{2.24}$$

де L – нижня трикутна матриця з ненульовими діагональними елементами і U – верхня трикутна матриця з одиничною головною діагоналлю.

Зауважимо, якщо хоча б один з кутових мінорів матриці A дорівнював нулеві, то зазначений LU -розклад неможливий.

<u>Висновок</u>. **Метод Гауса можна використовувати тоді, і лише тоді, коли всі кутові мінори матриці A відмінні від нуля.**

Елементарні трикутні матриці. Було зазначено, що метод Гауса зумовлює розклад вихідної матриці у добуток двох трикутних. Детальніше описати структуру цих трикутних матриць можна за допомогою так званих елементарних трикутних матриць.

Матриця L_j називається <u>елементарною</u> <u>нижньою</u> <u>трикутною</u> <u>матрицею</u>, якщо вона має вигляд

$$L_j = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & \\ 0 & & l_{jj} & & 0 & \\ 0 & & l_{j+1,j} & 1 & & \\ \vdots & & \vdots & & \ddots & \\ 0 & & l_{mj} & & & 1 \end{pmatrix}.$$

У матриці L_j усі елементи головної діагоналі окрім l_{jj} дорівнюють одиниці. З решти елементів відмінними від нуля можуть бути лише елементи j -го стовпця, що розташовані нижче l_{jj}. Оберненою до L_j є елементарна нижня трикутна матриця

$$L_j^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ \vdots & \ddots & & & & \\ 0 & & 1/l_{jj} & & 0 & \\ 0 & & -l_{j+1,j}/l_{jj} & 1 & & \\ \vdots & & \vdots & & \ddots & \\ 0 & & -l_{mj}/l_{jj} & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Розглянемо спочатку для наочності систему $\mathrm{A}x = f$, яку складено з трьох рівнянь:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= f_1 , \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= f_2 , \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= f_3 . \end{aligned} \tag{2.31}$$

Після першого кроку виключення за методом Гауса перетворена система набуває вигляду

$$\begin{aligned} x_1 + \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 &= \frac{f_1}{a_{11}}, \\ \left(a_{22} - \frac{a_{21}a_{12}}{a_{11}}\right)x_2 + \left(a_{23} - \frac{a_{21}a_{13}}{a_{11}}\right)x_3 &= f_2 - \frac{a_{21}f_1}{a_{11}}, \\ \left(a_{32} - \frac{a_{31}a_{12}}{a_{11}}\right)x_2 + \left(a_{33} - \frac{a_{31}a_{13}}{a_{11}}\right)x_3 &= f_3 - \frac{a_{31}f_1}{a_{11}} . \end{aligned} \tag{2.32}$$

Звідси видно, що матрицю A_1 системи (2.32) одержують з вихідної матриці A шляхом множення A зліва на елементарну матрицю

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1/a_{11} & 0 & 0 \\ -a_{21}/a_{11} & 1 & 0 \\ -a_{31}/a_{11} & 0 & 1 \end{pmatrix} \qquad (2.33)$$

так, що $\mathrm{A}_1 = L_1\mathrm{A}$. При цьому систему (2.32) можна записати у вигляді

$$L_1\mathrm{A}x = L_1 f \; .$$

Матрицю (2.33) будемо називати елементарною трикутною матрицею, яка відповідає першому кроку виключення методу Гауса.

Перепишемо систему (2.32) у вигляді

$$\begin{aligned} x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_3 &= y_1 \; , \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 &= f_2^{(1)} \; , \\ a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 &= f_3^{(1)} \; . \end{aligned} \qquad (2.34)$$

Здійснимо другий крок методу Гауса, тобто виключимо невідому x_2 з останнього рівняння, тоді одержимо систему вигляду

$$\begin{aligned} x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_3 &= y_1 \; , \\ x_2 + c_{23}x_3 &= y_2 \; , \\ a_{33}^{(2)}x_3 &= f_3^{(2)}. \end{aligned} \qquad (2.35)$$

Можна переконатися, що перехід від (2.34) до (2.35) здійснюють завдяки множенню системи (2.34) на елементарну трикутну матрицю

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/a_{22}^{(1)} & 0 \\ 0 & -a_{32}^{(1)}/a_{22}^{(1)} & 1 \end{pmatrix} . \qquad (2.36)$$

Таким чином, після другого кроку виключення одержимо систему

$$L_2L_1\mathrm{A}x = L_2L_1 f \; , \qquad (2.37)$$

де матриці L_1 і L_2 означені згідно (2.33), (2.36).

Нарешті, домножаючи (2.37) на матрицю

$$L_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1/a_{33}^{(2)} \end{pmatrix}$$

одержимо систему

$$L_3L_2L_1\mathrm{A}x = L_3L_2L_1 f \; , \qquad (2.38)$$

матриця якої $U = L_3L_2L_1\mathrm{A}$ є верхньою трикутною матрицею з одиничною головною діагоналлю.

Звідки випливає, зокрема, що A=LU, де $L = L_1^{-1}L_2^{-1}L_3^{-1}$ – нижня трикутна матриця. Таким чином, LU-розклад матриці A може бути одержано за допомогою елементарних трикутних матриць: спочатку будують матриці L_1, L_2, L_3 та обчислюють $U = L_3 L_2 L_1 \mathrm{A}$, а потім знаходять $L = L_1^{-1} L_2^{-1} L_3^{-1}$. Зазначимо, що матриці L_k^{-1} мають простий вигляд

$$L_1^{-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & 1 & 0 \\ a_{31} & 0 & 1 \end{pmatrix};\ L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & 0 \\ 0 & a_{32}^{(1)} & 1 \end{pmatrix};\ L_3^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix};\ L = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22}^{(1)} & 0 \\ a_{31} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(2)} \end{pmatrix}.$$

причому на діагоналі матриці розташовано ведучі елементи методу виключення.

Запис методу Гауса у вигляді (2.38) детально описує процес виключення.

Усі вищезазначені перетворення справедливі і для системи рівнянь довільного порядку (2.18).

Процес виключення можна записати за формулою

$$L_m L_{m-1} \cdots L_1 \mathrm{A} x = L_m L_{m-1} \cdots L_1 f \ , \tag{2.39}$$

де елементарна нижня трикутна матриця L_k на k-му кроці виключення має вигляд

$$L_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \vdots & \ddots & & & \\ 0 & & 1\big/ a_{kk}^{(k-1)} & & 0 \\ 0 & & -a_{k+1,k}^{(k-1)}\big/ a_{kk}^{(k-1)} & 1 & \\ \vdots & & \vdots & & \ddots \\ 0 & & -a_{mk}^{(k-1)}\big/ a_{kk}^{(k-1)} & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Матриця L_k здійснює виключення невідомого x_k з рівнянь з номерами *k+1, k+2, ... ,m.*

Матриці L_k^{-1} існують і мають вигляд

$$L_k^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & \\ \vdots & \ddots & & & \\ 0 & & a_{kk}^{(k-1)} & & \\ 0 & & a_{k+1,k}^{(k-1)} & \ddots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & 1 \\ 0 & & a_{mk}^{(k-1)} & & & 1 \end{pmatrix}$$

2.1.4 Метод Гауса з вибором головного елементу

1. *Основна ідея методу.* Може статися, що система

$$Ax=f \tag{2.40}$$

має єдиний розв’язок, хоча якийсь з кутових мінорів матриці А дорівнює нулеві. У цьому разі звичайний метод Гауса виявляється непридатним , але можливо може бути застосований метод Гауса з вибором головного елементу.

Основна ідея методу полягає у тому, що на черговому кроці вилучається не наступне за номером невідоме, а те невідоме, коефіцієнт при якому є найбільшим за модулем. Таким чином, як ведучий елемент тут береться *головний*, тобто *найбільший за модулем елемент,* тим самим, якщо $|A|\neq 0$, то у процесі обчислень не буде з'являтися ділення на нуль.

Різні варіанти методу Гауса з вибором головного елементу покажемо на прикладі системи з двох рівнянь

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = f_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = f_2 \end{cases} \tag{2.41}$$

Припустимо, що $|a_{12}|>|a_{11}|$. Тоді на першому кроці будемо виключати змінну x_2. Такий спосіб еквівалентний тому, що дана система переписується у вигляді

$$\begin{cases} a_{12}x_2 + a_{11}x_1 = f_1 \\ a_{22}x_2 + a_{21}x_1 = f_2 \end{cases}$$

і тоді до отриманої системи застосовується перший крок звичайного методу Гауса. Зазначений спосіб виключення називається *методом Гауса з вибором головного елементу за рядком*. Він є еквівалентним звичайному методу Гауса до системи, у якій на кожному кроці виключення здійснюється відповідна перенумерація змінних.

Застосовується також метод Гауса з вибором головного елементу за стовпцем. Припустимо, що $|a_{21}|>|a_{11}|$. Перепишемо систему (2.41) у вигляді

$$\begin{cases} a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = f_2 \\ a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = f_1 \end{cases}$$

та до нової системи застосуємо на першому кроці звичайний метод Гауса. Отже, *метод Гауса з вибором головного елементу за стовпцем* еквівалентний застосуванню звичайного методу Гауса до системи, у якій на кожному кроці виключення здійснюється відповідна перенумерація рівнянь.

Іноді застосовується *метод Гауса з вибором головного елементу за всією матриц*ею, коли як ведучий вибирається максимальний за модулем елемент поміж усіх елементів матриці системи.

2. *Матриці переставлення.* Вище було показано, що звичайний метод Гауса можна записати у вигляді

$$L_m L_{m-1} \ldots L_1 A x = L_m L_{m-1} \ldots L_1 f,$$

де L_k, $k=\overline{1,m}$ – елементарні нижні трикутні матриці. Щоб одержати аналогічний запис методу Гауса з вибором головного елементу, необхідно розглянути матриці переставлення.

Означення 1. Матрицею переставлення P називається квадратна матриця, у якій у кожному рядку і в кожному стовпці тільки один елемент відрізняється від нуля і дорівнює одиниці.

Означення 2. Елементарною матрицею переставлення P_{kl} називається матриця, що одержана з одиничної матриці переставленням k-го та l-го рядків.

Наприклад, елементарними матрицями переставлення третього порядку є матриці

$$P_{12}=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_{13}=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P_{23}=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Зазначимо наступні властивості елементарних матриць переставлення, що випливають безпосередньо з їх означення.

1. Добуток двох (а отже і довільної кількості) елементарних матриць переставлення є матриця переставлення.

2. Для довільної квадратної матриці A матриця $P_{kl}A$ відрізняється від A переставленням k-го і l-го рядків.

3. Для довільної квадратної матриці A матриця AP_{kl} відрізняється від A переставленням k-го і l-го стовпців.

Приклад. Застосування елементарних матриць переставлення для опису методу Гауса з вибором головного елементу за стовпцем можна пояснити на такому прикладі системи третього порядку :

$$\begin{cases} x_1 + x_2 + x_3 = f_1 \\ 2x_1 + \quad + x_3 = f_2 \\ \quad 5x_2 + 3x_3 = f_3 \end{cases} \tag{2.43}$$

Система має вигляд (2.40), де

$$A=\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 0 & 5 & 3 \end{pmatrix}. \tag{2.44}$$

Максимальний елемент першого стовпця матриці A знаходиться у другому рядку. Тому необхідно змінити місцями перший та другий рядок і перейти до еквівалентної системи

$$\begin{cases} 2x_1 + \quad + x_3 = f_2 \\ x_1 + x_2 + x_3 = f_1 \\ \quad 5x_2 + 3x_3 = f_3 \end{cases} \tag{2.45}$$

Систему (2.45) можна записати у вигляді

$$P_{12}Ax = P_{12}f, \tag{2.46}$$

тобто вона одержується з системи (2.43) шляхом множення на матрицю переставлення

$$\mathrm{P}_{12}=\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Далі, до системи (2.45) потрібно застосувати перший крок звичайного методу Гауса. Цей крок є еквівалентним множенню системи (2.46) на елементарну нижню трикутну матрицю

$$L_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Як наслідок, від системи (2.46) перейдемо до еквівалентної системи

$$L_1P_{12}Ax = L_1P_{12}f, \tag{2.47}$$

або в розгорнутому вигляді

$$\begin{aligned} x_1 + \qquad \frac{1}{2}x_3 &= \frac{1}{2}f_2, \\ x_2 + \frac{1}{2}x_3 &= f_1 - \frac{1}{2}f_2, \\ 5x_2 + 3x_3 &= f_3. \end{aligned} \tag{2.48}$$

З останніх двох рівнянь системи (2.48) необхідно тепер виключити змінну x_2. Оскільки максимальний елемент першого стовпця скороченої системи

$$\begin{aligned} x_2 + \frac{1}{2}x_3 &= f_1 - \frac{1}{2}f_2, \\ 5x_2 + 3x_3 &= f_3 \end{aligned} \tag{2.49}$$

є елементом другого рядка, робимо у (2.49) переставлення рядків і від системи (2.48) переходимо до еквівалентної системи

$$\begin{aligned} x_1 + \qquad \frac{1}{2}x_3 &= \frac{1}{2}f_2, \\ 5x_2 + 3x_3 &= f_3, \\ x_2 + \frac{1}{2}x_3 &= f_1 - \frac{1}{2}f_2, \end{aligned} \tag{2.50}$$

яку можна записати у матричному вигляді як

$$P_{23}L_1P_{12}Ax = P_{23}L_1P_{12}f. \tag{2.51}$$

Отже, система (2.51) одержана з (2.48) застосуванням елементарної матриці переставлення

$$P_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Далі до системи (2.50) треба застосувати другий крок виключення звичайного методу Гауса. Це еквівалентно множенню системи (2.50) на елементарну нижню трикутну матрицю

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/5 & 0 \\ 0 & -1/5 & 1 \end{pmatrix}.$$

Як наслідок, одержуємо систему

$$L_2P_{23}L_1P_{12}Ax = L_2P_{23}L_1P_{12}f \qquad (2.52)$$

або

$$\begin{aligned} x_1 + \quad & \frac{1}{2}x_3 &= \quad & \frac{1}{2}f_2, \\ x_2 + \quad & \frac{3}{5}x_3 &= \quad & \frac{1}{5}f_3, \\ & -\frac{1}{10}x_3 &= \quad & f_1 - \frac{1}{2}f_2 - \frac{1}{5}f_3. \end{aligned} \qquad (2.53)$$

Заключний крок прямого ходу методу Гауса полягає в заміні останнього рівняння системи (2.53) рівнянням

$$x_3 = -10\left(f_1 - \frac{1}{2}f_2 - \frac{1}{5}f_3\right),$$

що є еквівалентним множенню (2.52) на елементарну нижню трикутну матрицю

$$L_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -10 \end{pmatrix}.$$

Отже, для розглянутого прикладу процес виключення Гауса з вибором головного елемента за стовпцем записується у вигляді

$$L_3L_2P_{23}L_1P_{12}Ax = L_3L_2P_{23}L_1P_{12}\,f. \qquad (2.54)$$

За побудовою матриця

$$U = L_3L_2P_{23}L_1P_{12}A \qquad (2.55)$$

є верхньою трикутною матрицею з одиничною головною діагоналлю.

Відмінність від звичайного методу Гауса полягає у тому, що множниками у (2.55) поряд з елементарними трикутними матрицями L_k можуть бути елементарні матриці переставлення P_{kl} .

Покажемо ще, що з (2.55) отримуємо розклад

$$\underline{PA = LU}\,, \qquad (2.56)$$

де L – нижня трикутна матриця, що має обернену, P – матриця переставлення.

Для цього відшукаємо матрицю

$$\tilde{L}_1 = P_{23}\,L_1P_{23}. \qquad (2.57)$$

За властивістю 2) матриця $P_{23}\,L_1$ одержується з матриці L_1 переставленням другого та третього рядка,

$$P_{23}\,L_1 = \begin{pmatrix} ½ & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -½ & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Матриця $\tilde{L}_1$ згідно з властивістю 3) одержується з $P_{23}\ L_1$ переставленням другого та третього стовпця

$$\tilde{L}_1 = \begin{pmatrix} ½ & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ -½ & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

де $\tilde{L}_1$ – нижня трикутна матриця, що має обернену.

З виразу (2.57), враховуючи рівність $P_{23}^{-1} = P_{23}$, одержуємо

$$\tilde{L}_1\ P_{23} = P_{23}\ L_1. \tag{2.58}$$

Звідси та з (2.55) видно, що

$$U = L_3\ L_2\ \tilde{L}_1\ P_{23} P_{12}\ A = L^{-1} PA, \tag{2.59}$$

де позначено $P = P_{23} P_{12}$, $L = \tilde{L}_1^{\ -1}\ L_2^{-1}\ L_3^{-1}$. Оскільки P – матриця переставлення та L – нижня трикутна матриця, властивість (2.56) доведена. Вона означає, що метод Гауса з вибором головного елемента за стовпцем еквівалентний звичайному методу Гауса , застосованому до матриці PA, тобто до системи, що одержується з вихідної системи переставленням деяких рівнянь.

3. *Загальний висновок*. Результат, одержаний раніше для найпростішого окремого прикладу, вірний і у випадку загальної системи рівнянь (2.40). А саме, метод Гауса з вибором головного елемента за стовпцем можна записати у вигляді

$$L_m L_{m-1} P_{m-1,\, j_{m-1}} L_{m-2} \ldots L_2 P_{2,\, j_2} L_1 P_{1,\, j_1} A = L_m L_{m-1} P_{m-1,\, j_{m-1}} L_{m-2} \ldots L_2\ P_{2,\, j_2} L_1\ P_{1,\, j_1}\ f\ , \tag{2.60}$$

де $P_{k,\, j_k}$ – елементарні матриці переставлення такі, що $k \le j_k \le m$ та L_k – елементарні нижні трикутні матриці.

Звідси, використовуючи співвідношення переставлення, аналогічні (2.58), можна показати, що можливість застосування методу Гауса з вибором головного елемента дає наступна теорема.

Теорема. Якщо $|A|\neq 0$, то існує матриця переставлення P така, що матриця PA має відмінні від нуля кутові мінори.

Наслідок. Якщо $|A|\neq 0$, то існує матриця переставлення P така, що є вірним розклад

$$PA = LU\ , \tag{2.61}$$

де L – нижня трикутна матриця з відмінними від нуля діагональними елементами та U – верхня трикутна матриця з одиничною головною діагоналлю.

Зауважимо, що в методі Гауса з вибором головного елементу матриця P не задається заздалегідь, а будується в процесі виключення, як це було показано в прикладі. Як правило, не потрібно знати цю матрицю у явному вигляді.

2.1.5 Обчислення визначника методом Гауса з вибором головного елемента

Одночасно з розв'язанням системи лінійних алгебраїчних рівнянь

$$Ax = f$$

можна обчислити визначник матриці A.

Нехай у процесі виключення знайдено розклад

$$PA = LU,$$

тобто побудовані матриці L і U. Тоді

$$|PA| = |L| * |U| = |L| = l_{11} l_{22} \ldots l_{mm},$$

і, таким чином, добуток діагональних елементів матриці L (ведучих, головних елементів методу виключення) дорівнює визначнику матриці PA. Оскільки матриці PA і A відрізняються тільки переставленням рядків, визначник матриці PA може відрізнятися від визначника матриці A тільки знаком.

А саме,

$$|A| = \begin{cases} |PA|, & \text{коли кількість переставлень парна,} \\ -|PA|, & \text{коли кількість переставлень непарна.} \end{cases}$$

Отже, для обчислення визначника необхідно знати, скільки переставлень було здійснено у процесі виключення.

Коли матриця A вироджена, то у разі використання методу Гауса з вибором головного елемента за стовпцем на деякому кроці виключення k усі елементи k-го стовпця, що знаходяться нижче головної діагоналі та на ній, будуть дорівнювати нулеві. При цьому подальше виключення стає неможливим і програма має видати інформацію про те, що визначник матриці дорівнює нулеві.

2.1.6 Обернення матриць

Обчислення матриці, оберненої до матриці A, еквівалентно до розв'язання матричного рівняння

$$AX = E, \tag{2.63}$$

де E – одинична матриця, X – шукана квадратна матриця.

Рівняння (2.63) можна записати у вигляді системи m^2 рівнянь

$$\sum_{k=1}^{m} a_{ik} x_{kj} = \delta_{ij}, \quad i, j = \overline{i, m}, \tag{2.64}$$

де $\delta_{ij} = 1$ при $i=j$, та $\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$.

Можна відзначити, що система (2.64) розпадається на m незалежних систем рівнянь з однією і тією самою матрицею A , але з різними правими частинами. Ці системи мають вигляд (фіксуємо j) :

$$Ax^{(j)} = \delta^{(j)}, \quad j = \overline{1, m}, \tag{2.65}$$

де $x^{(j)} = (x_{1j}, x_{2j}, \ldots, x_{mj})^T$, у вектора $\delta^{(j)}$ дорівнює одиниці j-та компонента і дорівнюють нулеві інші компоненти.

Наприклад, для матриці другого порядку система (2.64) розпадається на дві незалежні системи:

$$\begin{cases} a_{11}x_{11} + a_{12}x_{21} = 1, \\ a_{21}x_{11} + a_{22}x_{21} = 0, \end{cases} \qquad \begin{cases} a_{11}x_{12} + a_{12}x_{22} = 0, \\ a_{21}x_{12} + a_{22}x_{22} = 1. \end{cases}$$

Для розв'язання систем (2.65) використовується метод Гауса (звичайний або з вибором головного елемента).

Розглянемо застосування методу Гауса без вибору головного елементу. Оскільки усі системи (2.65) мають однакову матрицю A, достатньо один раз провести прямий хід методу Гауса, тобто одержати розклад $A=LU$ та запам'ятати матриці L і U.

Зворотний хід здійснюється завдяки розв'язанню систем рівнянь

$$\begin{aligned} &Ly^{(j)} = \delta^{(j)} \quad , \quad y^{(j)} = (y_{1j}, y_{2j}, \ldots, y_{mj})^T , \\ &Ux^{(j)} = y^{(j)} \quad , \quad j = \overline{1,m} , \end{aligned} \tag{2.66}$$

з трикутними матрицями L та U.

При здійсненні зворотного ходу можна скоротити кількість дій, враховуючи спеціальний вигляд правих частин системи (2.66).

Запишемо докладніше перші $j-1$ рівнянь системи (2.66):

$$\begin{aligned} &l_{11}y_{1j} = 0, \\ &l_{21}y_{1j} + l_{22}y_{2j} = 0, \\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ &l_{j-1,1}y_{1j} + l_{j-1,2}y_{2j} + \cdots + l_{j-1,j-1}y_{j-1,j} = 0. \end{aligned} \tag{2.67}$$

Враховуючи невиродженість матриці L (тобто $l_{ii} \neq 0,\ \mathrm{i} = \overline{1,\mathrm{m}}$) звідси одержуємо

$$y_{1j} = y_{2j} = \ldots = y_{j-1,j} = 0. \tag{2.68}$$

При цьому інші рівняння системи (2.66) мають вигляд

$$\begin{aligned} &l_{jj}y_{jj} = 1, \\ &l_{ij}y_{jj} + l_{i,j+1}y_{j+1,j} + \ldots + l_{ii}y_{ij} = 0, \quad i = \overline{j+1,m}. \end{aligned}$$

Звідси послідовно знаходяться невідомі y_{ij} за формулами:

$$\begin{aligned} &y_{jj} = 1/l_{jj} , \\ &y_{ij} = -\sum_{k=j}^{i-1} l_{ik} \, y_{kj}/l_{ii} , \quad i = \overline{j+1,m}. \end{aligned} \tag{2.69}$$

Можна показати, що загальна кількість дій множення і ділення, необхідних для обернення матриці зазначеним способом, дорівнює m^3. Тим самим обернення матриці потребує не набагато більше часу, ніж розв'язання системи рівнянь.

2.1.7 Метод прогону

Ми розглянули ряд методів розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь $Ay = f$ з матрицею $A = \|a_{ij}\|$ загального вигляду. Для деяких задач, які будуть розглянуті пізніше, становить інтерес розв'язання систем рівнянь з матрицями A спеціального вигляду. Зокрема, при розв'язанні крайових задач для диференціальних рівнянь другого порядку, при побудові інтерполяційних сплайнів, нам буде необхідно розв'язувати системи лінійних алгебраїчних рівнянь з тридіагональною матрицею $A = \|a_{ij}\|$, тобто з матрицею, у якої всі елементи, що не розташовані на головній та двох побічних діагоналях, дорівнюють нулеві ($a_{ij} = 0$ при $j > i + 1$ та $j < i - 1$).

У загальному випадку систему лінійних алгебраїчних рівнянь з тридіагональною матрицею можна подати у вигляді

$$a_j y_{j-1} - c_j y_j + b_j y_{j+1} = -f_j,\ j = \overline{1, N-1}, \tag{2.70}$$

$$y_0 = \chi_1 y_1 + \mu_1, y_N = \chi_2 y_{N-1} + \mu_2. \tag{2.71}$$

Для чисельного розв'язання систем з тридіагональною матрицею застосовується *метод прогону*, що являє собою варіант методу послідовного виключення невідомих.

Матриця A для системи (2.70), (2.71) має вигляд

$$A = \begin{pmatrix} 1 & -\chi_1 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ a_1 & -c_1 & b_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_2 & -c_2 & b_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & . & . & \cdots & . & . & . \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{N-1} & -c_{N-1} & b_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & -\chi_2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ідея методу прогону полягає у наступному. Розв'язок системи шукається у вигляді

$$y_j = \alpha_{j+1} y_{j+1} + \beta_{j+1}, \qquad j = \overline{0, N-1}, \tag{2.72}$$

де α_{j+1}, β_{j+1} – невідомі коефіцієнти, які послідовно знаходять від α_1, β_1 до α_N, β_N (*прямий прогон*), а потім послідовно обчислюють $y_N, y_{N-1}, \ldots, y_0$ (*зворотний прогон*) .

Виведемо формули для обчислення $\alpha_{j+1}, \beta_{j+1}$. З (2.72) можна одержати

$$\begin{aligned} y_{j-1} &= \alpha_j y_j + \beta_j = \alpha_j(\alpha_{j+1} y_{j+1} + \beta_{j+1}) + \beta_j = \\ &= \alpha_j \alpha_{j+1} y_{j+1} + (\alpha_j \beta_{j+1} + \beta_j), \qquad j = \overline{1, N-1}. \end{aligned}$$

Підставляючи вирази для y_j, y_{j-1} до рівняння (2.70), приходимо при $j = \overline{1, N-1}$ до рівняння $\left[\alpha_{j+1}(a_j\alpha_j - c_j) + b_j\right] y_{j+1} + \left[\beta_{j+1}(a_j\alpha_j - c_j) + a_j\beta_j + f_j\right] = 0.$ Останнє рівняння буде виконуватись, коли коефіцієнти $\alpha_{j+1}, \beta_{j+1}$ узяти такими, щоб вирази у квадратних дужках дорівнювали б нулеві.

А саме, достатньо покласти

$$\alpha_{j+1} = \frac{b_j}{c_j - \alpha_j a_j}, \quad \beta_{j+1} = \frac{a_j \beta_j + f_j}{c_j - \alpha_j a_j}, \quad j = \overline{1, N-1}. \tag{2.73}$$

Для обчислення всіх α_j, β_j достатньо задати значення α_1, β_1. Ці початкові значення знайдемо з вимоги еквівалентності умови (2.72) при $j = 0$, тобто умови $y_0 = \alpha_1 y_1 + \beta_1$, першому з рівнянь (2.71).

Отже, одержуємо

$$\alpha_1 = \chi_1, \qquad \beta_1 = \mu_1. \tag{2.74}$$

Обчислення коефіцієнтів $\alpha_{j+1}, \beta_{j+1}$ за формулами (2.73), (2.74) називається *прямим прогоном*. Після того, як прогоночні коефіцієнти α_{j+1}, β_{j+1}, $j = \overline{0, N-1}$, знайдені, розв'язок системи (2.70), (2.71) відшукується за рекурентною формулою (2.72), починаючи з $j = N-1$. Для початку обчислення за цією формулою потрібно знайти y_N, яке можна визначити з рівнянь

$$y_N = \chi_2 y_{N-1} + \mu_2, \quad y_{N-1} = \alpha_N y_N + \beta_N.$$

Очевидно, воно дорівнює

$$y_N = \frac{\chi_2 \beta_N + \mu_2}{1 - \chi_2 \alpha_N}.$$

Обчислення y_i за формулами

$$y_j = \alpha_{j+1} y_{j+1} + \beta_{j+1}, \quad j = \overline{N-1, 0}, \tag{2.75}$$

$$y_N = \frac{\chi_2 \beta_N + \mu_2}{1 - \chi_2 \alpha_N} \tag{2.76}$$

називається *оберним прогоном*. Алгоритм розв'язку системи (2.70), (2.71) за формулами (2.73)-(2.75) називається *методом прогону*.

Метод прогону можна використовувати, коли знаменники у виразах (2.73), (2.75) не дорівнюють нулеві.

Доведемо, що для можливості застосування методу прогону достатньо вимагати, щоб коефіцієнти системи (2.70), (2.71) задовольняли умови

$$\begin{gathered} \alpha_j \neq 0, \quad b_j \neq 0, \quad |c_j| \geq |a_j| + |b_j|, \quad j = \overline{1, N-1}, \\ |\chi_1| \leq 1, \quad |\chi_2| < 1. \end{gathered} \tag{2.77}$$

Спочатку доведемо за індукцією, що за умов (2.77) модулі прогоночних коефіцієнтів α_j, $j = \overline{1, N}$ не перевищують одиниці. Згідно з виразами (2.74), (2.77) маємо $|\alpha_1| = |\chi_1| \leq 1$. Припустимо, що $|\alpha_j| \leq 1$ для деякого j та доведемо, що $|\alpha_{j+1}| \leq 1$.

Передусім для довільних двох чисел a та b доведемо нерівність

$$|a - b| \geq |a| - |b|.$$

За нерівністю трикутника маємо

$$|a| = |a - b + b| \le |a - b| + |b|.$$

Звідки

$$|a - b| \ge |a| - |b|.$$

Повернемося до доведення $|\alpha_{j+1}| \le 1$, коли $|\alpha_j| \le 1$. Згідно з доведеною нерівністю маємо оцінку

$$|c_j - \alpha_j a_j| \ge |c_j| - |\alpha_j||a_j| \ge |c_j| - |a_j|,$$

та, використовуючи (2.77) , одержуємо

$$|c_j - \alpha_j a_j| \ge |b_j| > 0,$$

тобто знаменники виразів (2.73) не дорівнюють нулеві.

Більш того,

$$|a_{j+1}| = \frac{|b_j|}{|c_j - \alpha_j a_j|} \le 1.$$

Таким чином, $|\alpha_j| \le 1, \quad j \ne \overline{1, N}$.

Далі, враховуючи другу з умов (2.77) та й тільки що доведену нерівність $|\alpha_N| \le 1$, маємо

$$|1 - \chi_2 \alpha_N| \ge 1 - |\chi_2||\alpha_N| \ge 1 - |\chi_2| > 0,$$

тобто не дорівнює нулеві і знаменник у виразі для y_N.

До аналогічного висновку можна дійти і в тому разі, коли умови (2.77) замінюються умовами

$$a_j \ne 0; \beta_j \ne 0; |c_j| > |a_j| + |b_j|; \ j = \overline{1, N-1}, \tag{2.78}$$

$$|\chi_1| \le 1; |\chi_2| \le 1. \tag{2.79}$$

Отже, у разі виконання умов (2.77) (або умов (2.78), (2.79)) система (2.70), (2.71) є еквівалентною системі (2.75)-(2.76). Тому ці умови гарантують існування та єдиність розв’язку системи (2.70), (2.71) та можливість обчислення цього розв’язку методом прогону.

Окрім того, доведені нерівності $|\alpha_j| \le 1, \quad j = \overline{1, N}$ забезпечують стійкість обчислення за рекурентними формулами (2.75). Останнє означає, що похибка, одержана на якомусь кроці обчислень, не буде збільшуватися при переході до наступних кроків.

Дійсно, нехай у формулі (2.75) при $j = j_0 + 1$ замість y_{j_0+1} обчислена величина $\tilde{y}_{j_0+1} = y_{j_0+1} + \delta_{j_0+1}$.

Тоді на наступному кроці обчислень, тобто при $j = j_0$, замість

$y_{j_0} = \alpha_{j_0+1} y_{j_0+1} + \beta_{j_0+1}$ одержимо величину $\tilde{y}_{j_0} = \alpha_{j_0+1}(y_{j_0+1} + \delta_{j_0+1}) + \beta_{j_0+1}$ та похибка буде дорівнювати

$$\delta_{j_0} = \tilde{y}_{j_0} - y_{j_0} = \alpha_{j_0+1}\delta_{j_0+1}.$$

Звідси отримуємо, що $\left|\delta_{j_0}\right| = \left|\alpha_{j_0+1}\right|\left|\delta_{j_0+1}\right| \le \left|\delta_{j_0+1}\right|$, тобто похибка не збільшується.

Підрахуємо число арифметичних дій, що їх потребує розв'язок задачі (2.70), (2.71) методом прогону. За формулами (2.73), що реалізуються за допомогою шести арифметичних дій, обчислення здійснюються $N-1$ разів, за формулою (2.76) виконується 5 арифметичних дій, нарешті, за формулою (2.72), що потребує всього дві дії, обчислення виконуються N разів. Отож у методі прогону всього виконується

$$Q = 6(N-1) + 5 + 2N = 8(N+1) - 9$$

арифметичних дій, тобто кількість дій зростає лінійно відносно кількості невідомих $N+1$.

Нагадаємо, що при розв'язанні довільної системи лінійних алгебраїчних рівнянь методом Гауса кількість дій пропорційна кубу кількості невідомих.