

Алгоритмы решения линейных систем уравнений

Оглавление

1. Введение.....	1
1.1. Обозначения	2
2. Метод Холецкого (квадратного корня).....	2
2.1. Разложение Холецкого	2
2.2. Алгоритм построения разложения Холецкого.....	3
2.3. Оценка количества арифметических операций в алгоритме построения разложения Холецкого	4
3. Методы решения линейных систем, основанные на унитарных преобразованиях матриц	5
4. Метод вращений	6
4.1. Матрица элементарного вращения и ее свойства	6
4.2. Алгоритм метода вращений.....	8
4.3. Оценка количества арифметических операций в методе вращений.....	10
4.4. Построение QR - разложения методом вращений	11
4.5. Оценка количества арифметических операций в алгоритме построения QR - разложения методом вращений	13
Литература.....	13
Материалы на сайте CAT.....	13

1. Введение

Одна из задач, наиболее часто встречающихся в научных вычислениях, – решение системы линейных уравнений. Для этого предложено множество способов. Общеизвестный метод, называемый методом Крамера^{*}, выражает каждую компоненту решения отношением двух определителей. Если, пользуясь этим методом, решать систему из n уравнений, то потребуется вычислить $n+1$ определителей n -го порядка. Однако при удачном выборе другого метода систему можно решить примерно за то же время, которое требуется для вычисления одного определителя.

^{*} G. Cramer (1704 – 1752); метод Крамера заключается в том, что $x_i = \frac{\det(A_i)}{\det A}$, где матрица A_i получается из A заменой i -ого столбца столбцом b .

Другой подход, математически привлекательный, но уязвимый в вычислительном отношении, заключается в том, что решение системы $Ax = b$ записывается в виде $x = A^{-1}b$, где A^{-1} – обратная матрица. Его недостаток состоит в том, что практически в любом конкретном приложении нет необходимости вычислять A^{-1} . В качестве крайнего, но поучительного примера рассмотрим систему, состоящую из одного уравнения $7x = 21$. Наилучший способ решения этой системы – деление $x = 21/7 = 3$. Использование обратной матрицы привело бы к вычислению $x = (7^{-1})21 = 2.99997$. Второй способ требует больше арифметических операций и дает менее точный результат. Лишние действия – это главная причина, по которой рекомендуется избегать обращения матриц. Все сказанное справедливо и для систем со многими уравнениями, а так же и в распространенном случае, когда имеется несколько систем уравнений с одной и той же матрицей A , но различными правыми частями b . Поэтому уделим основное внимание прямому методу решения систем, а не вычислению обратной матрицы. Методы, обсуждаемые в дальнейшем, имеют ряд преимуществ по сравнению с вычислением обратной матрицы:

- Они значительно дешевле в плане вычислительных затрат;
- В общем случае они дают более точные ответы;
- Они являются более гибкими в следующем смысле: матрица системы приводится к такой форме, что все произведения вида $Ab, A^T b$ легко вычисляются для любого вектора b .
- Они более информативны в том отношении, что позволяют дать оценку точности вычисленного решения.

Во всех этих методах матрица системы разлагается на произведение матриц более простого вида.

1.1. Обозначения

Обозначим через \mathbf{M}_n пространство (кольцо) матриц размера $n \times n$ над полем \mathbf{C} или \mathbf{R} .

Остальные обозначения аналогичны обозначениям в статье [1]. Здесь мы не будем повторять основные положения теории матриц и линейных систем, читатель найдет всю необходимую информацию в упомянутой статье.

2. Метод Холецкого* (квадратного корня)

Пусть требуется решить линейную систему $Ax = b$ с симметричной матрицей $A \in \mathbf{M}_n, A^T = A$.

2.1. Разложение Холецкого

Обозначим через $RT(n)$ подгруппу невырожденных верхних треугольных матриц в \mathbf{M}_n , а через $UT(n)$ – подгруппу в $RT(n)$ матриц с единицами на главной диагонали.

* А.-Л. Cholesky (1875 – 1918); описание метода опубликовано в 1924.

Теорема. Пусть матрица A - симметричная и все ее главные угловые миноры отличны от нуля. Тогда существуют матрицы $R = (r_{ij}) \in RT(n) : r_{ij} > 0 \ \forall i = 1, \dots, n$ и диагональная матрица $D : d_{ii} \in \{-1, 1\} \ \forall i = 1, \dots, n$ такие, что $A = R^T D R$.

Доказательство. Из условия теоремы следует, что для матрицы A осуществимо LU -разложение, т.е. существуют $L \in LT(n)$ и $U \in UT(n)$ такие, что $A = LU$. Поскольку матрица L обратима, то $l_{ii} \neq 0 \ \forall i = 1, \dots, n$ и тогда матрица $\hat{D} = \text{diag}(l_{11}, \dots, l_{nn})$ обратима, $(\hat{D})^{-1} = \text{diag}(l_{11}^{-1}, \dots, l_{nn}^{-1})$. Положим $\hat{L} = L(\hat{D})^{-1} \in LT(n)$ и по правилам перемножения матриц $\hat{l}_{ii} = 1, i = 1, \dots, n$.

Подставим представление матрицы $L = \hat{L} \hat{D}$ в LU -разложение матрицы $A : A = \hat{L} \hat{D} U$. Так как $A^T = A$, то

$$A = \hat{L} \hat{D} U = A^T = U^T (\hat{D})^T (\hat{L})^T \Rightarrow U = (\hat{D})^{-1} (\hat{L})^{-1} U^T (\hat{D})^T (\hat{L})^T \Rightarrow U((\hat{L})^T)^{-1} = (\hat{D})^{-1} (\hat{L})^{-1} U^T (\hat{D})^T.$$

Заметим, что $(\hat{L})^T \in RT(n)$, причем главная диагональ этой матрицы состоит из единиц, следовательно, $(\hat{L})^T \in UT(n)$, таким образом, $U((\hat{L})^T)^{-1} \in UT(n)$. В правой же части этого равенства стоит произведение нижних треугольных матриц, которое является опять нижней треугольной матрицей, т.е. принадлежит $LT(n)$. Поэтому получаем, $U((\hat{L})^T)^{-1} \in UT(n) \cap LT(n)$. Единственной матрицей, которая принадлежит этому пересечению, является I - единичная матрица. Следовательно, $U((\hat{L})^T)^{-1} = (\hat{D})^{-1} (\hat{L})^{-1} U^T (\hat{D})^T = I$. Таким образом, $U = (\hat{L})^T$ и $A = U^T (\hat{D})^T U$. Заметим, что $I = (\hat{D})^{-1} (\hat{L})^{-1} U^T (\hat{D})^T = (\hat{D})^{-1} (\hat{L})^{-1} ((\hat{L})^T)^T (\hat{D})^T = (\hat{D})^{-1} (\hat{L})^{-1} (\hat{L}) (\hat{D})^T = (\hat{D})^{-1} (\hat{D})^T$. Представив матрицу \hat{D} в виде $\hat{D} = |\hat{D}|^{1/2} D |\hat{D}|^{1/2}$, где $|\hat{D}|^{1/2} = \text{diag}(\sqrt{|l_{11}|}, \dots, \sqrt{|l_{nn}|})$ и $D = \text{diag}(\text{sign } l_{11}, \dots, \text{sign } l_{nn})$, получаем, что $A = U^T |\hat{D}|^{1/2} D |\hat{D}|^{1/2} U$. Обозначим $R = |\hat{D}|^{1/2} U \in RT(n)$, тогда $A = R^T D R$. ■

2.2. Алгоритм построения разложения Холецкого

Элемент (k, j) матрицы DR равен $(DR)_{kj} = \sum_{i=1}^n d_{ki} r_{ij} = d_{kk} r_{kj}$, так как матрица D - диагональная;

элемент (i, k) матрицы R^T равен $(R^T)_{ik} = r_{ki}$; элемент (i, j) матрицы $R^T D R$ равен

$(R^T D R)_{ij} = \sum_{k=1}^n (R^T)_{ik} (DR)_{kj} = \sum_{k=1}^n r_{ki} d_{kk} r_{kj}$. Следовательно, равенство $A = R^T D R$ дает систему уравнений

$a_{ij} = \sum_{k=1}^n r_{ki} d_{kk} r_{kj}, \ i, j = 1, \dots, n$. Поскольку матрица A симметрична, то $a_{ji} = a_{ij}$, и предыдущая

система эквивалентна системе $a_{ij} = \sum_{k=1}^n r_{ki} d_{kk} r_{kj}, \ i < j, \ i, j = 1, \dots, n$. Она представляет собой систему

из $\frac{n(n+1)}{2}$ уравнений с $\frac{n(n+1)}{2}$ неизвестными r_{ij} и n неизвестными $d_{kk}, \ k = 1, \dots, n$.

Получим формулы для решения данной системы, которые и составляют алгоритм метода Холецкого.

Перепишем систему в виде $a_{ij} = \sum_{k=1}^i r_{ki} d_{kk} r_{kj} + \sum_{k=i+1}^n r_{ki} d_{kk} r_{kj}$, $i < j$, $i, j = 1, \dots, n$. Поскольку матрица $R \in RT(n)$, то $r_{ki} = 0$, $k > i$. Следовательно, система эквивалентна следующей:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki} d_{kk} r_{kj} + r_{ii} d_{ii} r_{ij}, \quad i < j, \quad i, j = 1, \dots, n. \text{ Выделим отдельно случай } i = j$$

$$\begin{cases} r_{ii}^2 d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}^2 d_{kk}, & i = 1, \dots, n \\ r_{ii} d_{ij} r_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki} d_{kk} r_{kj}, & i < j, \quad i, j = 1, \dots, n. \end{cases}$$

Отсюда получаем расчетные формулы:

$$\begin{cases} d_{ii} = \text{sign}(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}^2 d_{kk}), & i = 1, \dots, n \\ r_{ii} = \sqrt{|a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki}^2 d_{kk}|}, & i = 1, \dots, n \\ r_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} r_{ki} d_{kk} r_{kj}}{r_{ii} d_{ij}}, & i < j, \quad i, j = 1, \dots, n. \end{cases}$$

Процесс вычислений по этим формулам строится следующим образом: вначале вычисляются неизвестные элементы первых строк матриц D и R :

$$d_{11} = \text{sign } a_{11}, \quad r_{11} = \sqrt{|a_{11}|}, \quad r_{1j} = \frac{a_{1j}}{r_{11} d_{11}}, \quad j = 2, \dots, n;$$

потом по приведенным формулам при $i = 2$ вычисляются неизвестные элементы вторых строк матриц D и R и так далее.

В том случае, когда матрица A является положительно определенной, то все $d_{ii} = 1$, и расчетные формулы можно немного упростить.

Заметим, что достаточно хранить только нижний треугольник матрицы A , а оставшееся место можно заполнить элементами матрицы R .

2.3. Оценка количества арифметических операций в алгоритме построения разложения Холецкого

Вычисление элемента d_{ii} требует $i-1$ мультипликативных и столько же аддитивных операций.

Следовательно, вычисление всех элементов матрицы D требует $\sum_{i=1}^n (i-1) = \frac{n(n-1)}{2} \underset{n \rightarrow \infty}{=} O(n^2)$ операций.

Вычисление элемента r_{ij} требует одной операции извлечения корня, занимающей на вычислительных машинах, не имеющих аппаратной поддержки вычисления трансцендентных функций, время, равное времени выполнения $O(n)$ мультипликативных операций, и $i-1$

мультипликативных и столько же аддитивных операций. При фиксированном $i = 1, \dots, n$ вычисление элементов r_{ij} для всех $j = i+1, \dots, n$ требует $1 + \sum_{j=i+1}^n (i-1) = (i-1)(n-i) + 1$ мультипликативных и $(i-1)(n-i)$ аддитивных операций. Следовательно, вычисление всех элементов матрицы R требует n операций извлечения корня, $\sum_{i=1}^n ((n-i)(i-1) + (i-1) + 1) = n + \sum_{i=1}^n (n-i+1)(i-1) = n + n \sum_{i=1}^n (i-1) - \sum_{i=1}^n (i-1)^2$ мультипликативных и аддитивных операций. При $n \rightarrow \infty$ получаем асимптотическую оценку $\frac{n^3}{3} + O(n^2)$ на количество этих операций, что вдвое меньше, чем в методе Гаусса или алгоритме построения LU -разложения.

Для решения самой системы $Ax = b$, имея разложение матрицы A , достаточно повторить операции, аналогичные описанным в [1] для случая LUP -разложения.

3. Методы решения линейных систем, основанные на унитарных преобразованиях матриц

Введем ряд определений, которые будут необходимы при изучении степени неопределенности решаемой системы. Знание таких характеристик позволяет обоснованно подбирать методы и строить алгоритмы, правильно трактовать полученные результаты.

Матрица S , удовлетворяющая условию $(\bar{S})^T S = I$, называется **унитарной** (ортогональной в вещественном случае) матрицей.

Спектральной нормой называется $\|A\|_2 = \max\{\sqrt{\lambda} : \lambda - \text{собственное значение матрицы } A^* A\}$.

Здесь A^* означает матрицу, комплексно сопряженную к матрице $A^T \in \mathbf{M}_n$, если пространство \mathbf{M}_n над полем \mathbf{C} , и просто транспонированную матрицу, если пространство \mathbf{M}_n над полем \mathbf{R} .

Унитарно инвариантной матричной нормой называется матричная норма $\|\cdot\|$, удовлетворяющая равенству $\|A\| = \|UAV\|$ для всех матриц $A \in \mathbf{M}_n$ и всех унитарных матриц $U, V \in \mathbf{M}_n$.

Лемма. Спектральная норма является унитарно инвариантной. ■

Число обусловленности матрицы A по отношению к матричной норме $\|\cdot\|$ называется

$$\kappa(A) = \begin{cases} \|A\| \|A^{-1}\|, & \text{если } A \text{ невырождена,} \\ \infty, & \text{если } A \text{ вырождена.} \end{cases}$$

Можно показать, что чем больше число обусловленности, тем сильнее сказывается на решении линейной системы возмущение исходных данных.

Изложенный выше метод квадратного корня может быть представлен в виде последовательности элементарных преобразований матрицы. Каждое из преобразований задается некоторой матрицей P , так что применение этого преобразования эквивалентно умножению (слева)

исходной матрицы A на матрицу P . Таким образом, каждый шаг приведенного выше алгоритма есть переход от матрицы A к матрице $A := PA$. О числе обусловленности новой матрицы $A := PA$ можно лишь утверждать, что $\kappa(PA) \leq \kappa(P)\kappa(A)$. Поэтому может случиться так, что в процессе проведения преобразований число обусловленности матрицы возрастает, и на каждом шаге метод будет вносить все большую вычислительную погрешность. В результате может оказаться, что исходная матрица имела приемлемое число обусловленности, однако после нескольких шагов алгоритма оно уже слишком возросло, так что последующие шаги приведут к появлению очень большой вычислительной погрешности.

Возникает идея подбирать матрицы преобразования P так, чтобы число обусловленности матрицы в процессе преобразований не возрастало. Лемма указывает нам пример таких матриц: если матрица P унитарна, то относительно спектральной нормы $\kappa(PA) = \kappa(A)$.

Излагаемый ниже метод вращений представляет собой алгоритм подбора унитарных матриц преобразований, таких, что в результате этих преобразований исходная матрица приводится к треугольному виду. Решение систем с треугольной матрицей описано в [1].

Несмотря на то, что трудоемкость этого метода больше, чем метода Гаусса (J. C. F. Gauss), данный метод получил широкое распространение в вычислительной практике благодаря своей устойчивости к накоплению вычислительной погрешности.

4. Метод вращений

В этом методе в качестве элементарного преобразования матрицы выбирается ее умножение на матрицу вращения.

4.1. Матрица элементарного вращения и ее свойства

Элементарным вращением $T_{ij} = T_{ij}(\varphi)$ называется преобразование пространства, задаваемое матрицей $T_{ij} = (t_{kl})_{k,l=1,\dots,n}$, в которой только следующие элементы отличны от нуля: $t_{ii} = \cos \varphi$, $t_{jj} = \cos \varphi$, $t_{ij} = -\sin \varphi$, $t_{ji} = \sin \varphi$, $t_{kk} = 1$, $\forall k = 1, \dots, n$, $k \neq i, j$:

$$T_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ & & & \cos \varphi & \cdots & \cdots & -\sin \varphi \\ & & & \vdots & 1 & & \vdots \\ & & & \vdots & & \ddots & \vdots \\ & & & \vdots & & & 1 & \vdots \\ & & \sin \varphi & \cdots & \cdots & \cdots & \cos \varphi & \\ & & & & & & & 1 & \ddots \\ & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

Если $\langle e_1, \dots, e_n \rangle$ – базис \mathbf{R}^n ($e_k = (\underbrace{0, \dots, 0}_{k-1}, 1, 0, \dots, 0)$), то T_{ij} является вращением в подпространстве

$\langle e_i, e_j \rangle$ и не изменяет подпространства $\langle e_1, \dots, e_{i-1}, e_{i+1}, \dots, e_{j-1}, e_{j+1}, \dots, e_n \rangle$, т.е. изменяет только i -ю и

j -ю координаты векторов. Поэтому для изучения свойств преобразования T_{ij} достаточно изучить свойства преобразования

$$T = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$$

в двумерном пространстве.

Лемма 1. Матрица T_{ij} является ортогональной матрицей.

Доказательство. Следует из ортогональности матрицы T . ■

Лемма 2. Для всякого вектора $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \in \mathbf{R}^2, \mathbf{r} \neq 0$ существует матрица $T = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}$, такая что $T\mathbf{r} = \|\mathbf{r}\| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$, где $\|\mathbf{r}\| = \sqrt{x^2 + y^2}$ – евклидова длина вектора \mathbf{r} . При этом трудоемкость построения матрицы T составляет 4 мультипликативные операции, одну аддитивную и одну операцию извлечения корня.

Доказательство. Достаточно положить $\cos \varphi = \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}, \sin \varphi = -\frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}$. ■

Лемма 3. Для всякого вектора $\mathbf{x} \in \mathbf{R}^n, \mathbf{x} \neq 0$ существует $n-1$ матриц $T_{12} = T_{12}(\varphi_{12}), T_{13} = T_{13}(\varphi_{13}), \dots, T_{1n} = T_{1n}(\varphi_{1n})$, таких, что $T_{1n} \dots T_{13} T_{12} \mathbf{x} = \|\mathbf{x}\| \mathbf{e}_1$, где $\|\mathbf{x}\| = \sqrt{\sum_{k=1}^n x_k^2}$ – евклидова длина вектора \mathbf{x} , $\mathbf{e}_1 = (1, 0, \dots, 0)$ – первый координатный орт.

Доказательство. Если вектор $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \neq 0$, то по лемме 2 существует матрица элементарного вращения $T = T(\varphi_{12}) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_{12} & -\sin \varphi_{12} \\ \sin \varphi_{12} & \cos \varphi_{12} \end{pmatrix}$, такая, что $T\mathbf{r} = \|\mathbf{r}\| \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$. Тогда матрица

$$T_{12} = T_{12}(\varphi_{12}) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_{12} & -\sin \varphi_{12} & & \\ \sin \varphi_{12} & \cos \varphi_{12} & & \\ & & 1 & \\ & & & \ddots \\ & & & & 1 \end{pmatrix}$$

переводит вектор \mathbf{x} в вектор $\mathbf{x}^{(2)} = T_{12}\mathbf{x} = (\sqrt{x_1^2 + x_2^2}, 0, x_3, \dots, x_n)$. Если вектор $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = 0$, то преобразование не осуществляется. После $k-1$ шагов этого процесса вектор \mathbf{x} преобразован к

виду $\mathbf{x}^{(k)} = T_{1k}\mathbf{x} \dots T_{12}\mathbf{x} = (\sqrt{\sum_{i=1}^k x_i^2}, 0, \dots, 0, x_{k+1}, \dots, x_n)$. Если вектор $\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \sqrt{\sum_{i=1}^k x_i^2} \\ x_{k+1} \end{pmatrix} \neq 0$ то по лемме 2

существует матрица элементарного вращения $T = T(\varphi_{1k+1}) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_{1k+1} & -\sin \varphi_{1k+1} \\ \sin \varphi_{1k+1} & \cos \varphi_{1k+1} \end{pmatrix}$ и, аналогично, матрица

$$T_{1k+1} = T_{1k+1}(\varphi_{1k+1}) = \begin{pmatrix} \cos \varphi_{1k+1} & \cdots & \cdots & \cdots & -\sin \varphi_{1k+1} & & \\ \vdots & 1 & & & \vdots & & \\ \vdots & & \ddots & & \vdots & & \\ \vdots & & & 1 & \vdots & & \\ \sin \varphi_{1k+1} & \cdots & \cdots & \cdots & \cos \varphi_{1k+1} & & \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & \ddots \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix}$$

переводит вектор $\mathbf{x}^{(k)}$ в вектор $\mathbf{x}^{(k+1)} = T_{1k+1}\mathbf{x} \dots T_{12}\mathbf{x} = (\sqrt{\sum_{i=1}^{k+1} x_i^2}, 0, \dots, 0, x_{k+2}, \dots, x_n)$. После $n-1$ шагов этого процесса вектор \mathbf{x} будет преобразован к виду $T_{1n} \dots T_{13} T_{12} \mathbf{x} = \|\mathbf{x}\| \mathbf{e}_1$. ■

Лемма 4. Произведение матрицы элементарного вращения на вектор может быть вычислено за 4 мультипликативные и 2 аддитивные операции.

Доказательство. Непосредственно следует из правила перемножения матриц. ■

Лемма 5. Произведение матрицы элементарного вращения на матрицу размерности $n \times m$ может быть вычислено за $4m$ мультипликативных и $2m$ аддитивных операций.

Доказательство. Непосредственно следует из правила перемножения матриц. ■

4.2. Алгоритм метода вращений

Обозначим $\mathbf{a}_1 = (a_{11}, \dots, a_{n1})^T$ – первый столбец матрицы A . Согласно лемме 3 существуют $n-1$ матриц $T_{12} = T_{12}(\varphi_{12}), T_{13} = T_{13}(\varphi_{13}), \dots, T_{1n} = T_{1n}(\varphi_{1n})$ таких, что $T_{1n} \dots T_{13} T_{12} \mathbf{a}_1 = \|\mathbf{a}_1\| \mathbf{e}_1$ (углы $\varphi_{1k}, k = 2, \dots, n$ определяются леммами 2,3). Умножая систему $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ на $T_{1n} \dots T_{13} T_{12}$ слева получим $A^{(1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(1)}$, где:

$$A^{(1)} = T_{1n} \dots T_{13} T_{12} A = \begin{pmatrix} \|\mathbf{a}_1\| & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \cdots & a_{nn}^{(1)} \end{pmatrix}, \mathbf{b}^{(1)} = T_{1n} \dots T_{13} T_{12} \mathbf{b}.$$

Далее процесс применяется к подматрице $(a_{ij}^{(1)})_{i,j=2,\dots,n}$.

Пусть проделаны $k-1, k = 1, \dots, n-1$ шагов этого процесса, и система преобразована к виду $A^{(k-1)}\mathbf{x} = \mathbf{b}^{(k-1)}$, где:

$$A^{(k-1)} = \prod_{i=k-1}^1 \prod_{j=n}^{i+1} T_{ij} A, \quad \mathbf{b}^{(k-1)} = \prod_{i=k-1}^1 \prod_{j=n}^{i+1} T_{ij} \mathbf{b},$$

$$A^{(k-1)} = \begin{pmatrix} \|a_1\| & c_{12} & c_{13} & \cdots & c_{1,k-1} & c_{1k} & \cdots & c_{1n} \\ & \|a_1^{(1)}\| & c_{23} & \cdots & c_{2,k-1} & c_{2k} & \cdots & c_{2n} \\ & & \|a_1^{(2)}\| & \cdots & c_{3,k-1} & c_{3k} & \cdots & c_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & \|a_1^{(k-2)}\| & c_{k-1,k} & \ddots & c_{k-1,n} \\ & & & & & a_{kk}^{(k-1)} & \cdots & a_{kn}^{(k-1)} \\ & & & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & & a_{nk}^{(k-1)} & \cdots & a_{nn}^{(k-1)} \end{pmatrix}$$

($\prod_{j=n}^{i+1}$ означает, что сомножители берутся в порядке $n, \dots, i+1$).

Обозначим $a_1^{(k-1)} = (a_{kk}^{(k-1)}, \dots, a_{nk}^{(k-1)})^T$ – первый столбец подматрицы $(a_{ij}^{(k-1)})_{i,j=k,\dots,n}$. По лемме 3 существуют $n-k$ матриц $T_{k,k+1} = T_{k,k+1}(\varphi_{k,k+1})$, $T_{k,k+2} = T_{k,k+2}(\varphi_{k,k+2})$, ..., $T_{k,n} = T_{k,n}(\varphi_{k,n})$ таких, что $T_{kn} \dots T_{k,k+2} T_{k,k+1} a_1^{(k-1)} = \|a_1^{(k-1)}\| e_1^{(n-k+1)}$ (углы φ_{kj} , $j = k+1, \dots, n$ определяются леммами 2 и 3, $e_1^{(m)} = (1, 0, \dots, 0)^T \in \mathbf{R}^m$). Умножим систему $A^{(k-1)}x = b^{(k-1)}$ на $T_{kn} \dots T_{k,k+2} T_{k,k+1}$ слева и придем к $A^{(k)}x = b^{(k)}$, где:

$$A^{(k)} = \prod_{j=n}^{k+1} T_{kj} A^{(k-1)} = \prod_{i=k}^1 \prod_{j=n}^{i+1} T_{ij} A, \quad b^{(k-1)} = \prod_{j=n}^{k+1} T_{kj} b^{(k-1)} = \prod_{i=k}^1 \prod_{j=n}^{i+1} T_{ij} b, \quad (1)$$

$$A^{(k)} = \begin{pmatrix} \|a_1\| & c_{12} & c_{13} & \cdots & c_{1,k-1} & c_{1k} & c_{1,k+1} & \cdots & c_{1n} \\ & \|a_1^{(1)}\| & c_{23} & \cdots & c_{2,k-1} & c_{2k} & c_{2,k+1} & \cdots & c_{2n} \\ & & \|a_1^{(2)}\| & \cdots & c_{3,k-1} & c_{3k} & c_{3,k+1} & \cdots & c_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & \|a_1^{(k-2)}\| & c_{k-1,k} & c_{k-1,k+1} & \cdots & c_{k-1,n} \\ & & & & & \|a_1^{(k-1)}\| & c_{k,k+1} & \cdots & c_{k,n} \\ & & & & & & a_{k+1,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{k+1,n}^{(k)} \\ & & & & & & \vdots & \ddots & \vdots \\ & & & & & & a_{n,k+1}^{(k)} & \cdots & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix}.$$

Заметим, что при получении $A^{(k)}$ каждая из $n-k$ матриц элементарных вращений T_{kj} такова, что $j > k$ и поэтому она умножается только на подматрицу $(a_{ij}^{(k-1)})_{i,j=k,\dots,n}$ матрицы $A^{(k-1)}$ размера $n-k+1$ (а остальная часть $A^{(k-1)}$ в преобразовании не участвует).

После $n-1$ таких переходов система примет вид $Rx = y$, где:

$$R = A^{(n-1)} = \prod_{i=n-1}^1 \prod_{j=n}^{i+1} T_{ij} A, \quad y = b^{(n-1)} = \prod_{i=n-1}^1 \prod_{j=n}^{i+1} T_{ij} b, \quad (2)$$

$$R = \begin{pmatrix} \|a_1\| & c_{12} & c_{13} & \cdots & c_{1,n-2} & c_{1,n-1} & c_{1n} \\ & \|a_1^{(1)}\| & c_{23} & \cdots & c_{2,n-2} & c_{2,n-1} & c_{2n} \\ & & \|a_1^{(2)}\| & \cdots & c_{3,n-2} & c_{3,n-1} & c_{3n} \\ & & & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ & & & & \|a_1^{(n-3)}\| & c_{n-2,n-1} & c_{n-2,n} \\ & & & & & \|a_1^{(n-2)}\| & c_{n-1,n} \\ & & & & & & \|a_1^{(n-1)}\| \end{pmatrix}.$$

Эта система с верхней треугольной матрицей R решается обратным ходом метода Гаусса.

4.3. Оценка количества арифметических операций в методе вращений

Оценим трудоемкость k -го шага алгоритма и просуммируем по всем $k = 1, \dots, n-1$ шагам.

1. На вычисление $n-k$ матриц $T_{k,k+1}, \dots, T_{kn}$ требуется $4(n-k)$ умножений, $n-k$ сложений и $n-k$ операций извлечения корня (Лемма 2).
2. На вычисление компонент k, \dots, n k -го столбца матрицы $A^{(k)}$ (т.е. компонент вектора $\|a_1^{(k-1)}\| e_1^{(n-k+1)}$) требуется $n-k+1$ умножений, $n-k$ сложений и 1 операция извлечения корня. Мы вычисляем столбец k , именно считая длину вектора $\|a_1^{(k-1)}\|$, (а не из общих формул (1)) для сокращения количества арифметических операций и уменьшения вычислительной погрешности.
3. В формуле (1) каждая из $n-k$ матриц элементарных вращений умножается на подматрицу $(a_{ij}^{(k-1)})_{i=k, \dots, n, j=k+1, \dots, n}$ матрицы $A^{(k-1)}$ размера $(n-k+1) \times (n-k)$ (учитывая пункт 2). На это потребуется $(n-k)4(n-k) = 4(n-k)^2$ умножений и $(n-k)2(n-k) = 2(n-k)^2$ сложений (Лемма 5).
4. На вычисление новой правой части по формуле (1) требуется $4(n-k)$ умножений и $n-k$ сложений (Лемма 4).

	Число мультипликативных операций	Число аддитивных операций	Число операций извлечения корня
k -ый шаг:	$4(n-k) + (n-k+1) +$ $+4(n-k)^2 + 4(n-k) =$ $4(n-k)^2 + 9(n-k) + 1$	$(n-k) + (n-k) +$ $+2(n-k)^2 + (n-k) =$ $2(n-k)^2 + 3(n-k)$	$n-k+1$
Итого:	$\sum_{k=1}^{n-1} (4(n-k)^2 + 9(n-k) + 1) =$ $4n(n-1)(2n-1)/6 +$ $+9n(n-1)/2 + n-1 =$	$\sum_{k=1}^{n-1} (2(n-k)^2 + 3(n-k)) =$ $2n^3/3 + O(n^2)$	$\sum_{k=1}^{n-1} (n-k+1) = O(n^2)$

	$4n^3/3 + O(n^2)$		
--	-------------------	--	--

Операция извлечения корня сравнима по трудоемкости с делением. На решение системы для матрицы R обратным ходом метода Гаусса требуется $O(n^2)$ арифметических операций.

Таким образом, на решение линейной системы методом вращений требуется $4n^3/3 + O(n^2)$ мультипликативных операций (в 4 раза больше, чем в методе Гаусса) и $2n^3/3 + O(n^2)$ аддитивных операций (в 2 раза больше, чем в методе Гаусса).

Теорема (О QR-разложении). Всякая невырожденная вещественная матрица A может быть представлена в виде $A = QR$, где матрица Q - ортогональная, а матрица R - верхняя треугольная с положительными элементами на главной диагонали. Это разложение единственно.

Доказательство. Проведем для матрицы A алгоритм метода вращений, осуществимый для любой невырожденной матрицы. Обозначим в (2) $\hat{Q} = \prod_{i=n-1}^1 \prod_{j=n}^{i+1} T_{ij}$. Матрица \hat{Q} как произведение ортогональных матриц ортогональна.

Тогда (2) имеет вид $R = \hat{Q}A \Rightarrow A = (\hat{Q})^{-1}R = QR$, где $Q = (\hat{Q})^{-1}$. Если $a_{nn}^{(n-1)} > 0$, то матрица R удовлетворяет условиям теоремы. Если $a_{nn}^{(n-1)} < 0$, то рассмотрим $D = \text{diag}(1, \dots, 1, \text{sign}(a_{nn}^{(n-1)}))$. Матрица D ортогональна и $D^2 = I$. Поэтому $A = (QD)(DR)$, где $Q := QD$ и $R := DR$ удовлетворяют условиям теоремы.

Пусть возможны 2 различные разложения $A = QR$ и $A = Q'R'$, удовлетворяющие условию теоремы. Тогда $QR = Q'R' \Rightarrow (Q')^{-1}Q = R'^{-1}R$. В левой части последнего равенства стоит ортогональная матрица, а в правой - верхняя треугольная. Тогда это может быть только матрица вида $D = \text{diag}(d_1, \dots, d_n)$, где $d_i \in \{-1, 1\}, i = 1, \dots, n$. Поскольку диагональные элементы матрицы $R'^{-1}R$ равны произведениям диагональных элементов матриц R и R' , то они положительны. Следовательно $R'^{-1}R = I \Rightarrow R = R'$ и $(Q')^{-1}Q = I \Rightarrow Q' = Q$. Полученное противоречие доказывает теорему. ■

Пример применения QR - разложения: Пусть стоит задача решить серию систем вида $Ax_j = b_j, j = 1, \dots, m$ с одной и той же матрицей A и разными b_j . Построим QR - разложение матрицы A (которое, в отличие от LU - разложения, существует для всякой невырожденной матрицы). Для ортогональной матрицы легко находится обратная $Q^{-1} = Q^T$. Поэтому x_j находятся как решения системы $Rx_j = Q^T b_j$ с верхней треугольной матрицей R , например, обратным ходом метода Гаусса. ■

4.4. Построение QR - разложения методом вращений

Для решения задачи построения QR - разложения матрицы A будем действовать как в предыдущей теореме. Проведем для матрицы A метод вращений и получим в результате матрицу R . При этом:

$$Q = \left(\prod_{l=n-1}^1 \prod_{j=n}^{l+1} T_{lj} \right)^T = \prod_{l=1}^{n-1} \prod_{j=l+1}^n T_{lj}^T. \quad (3)$$

Рассмотрим 2 способа хранения Q и R в памяти:

1. Матрица R хранится на месте верхнего треугольника матрицы A и получается из нее последовательным применением элементарных вращений. Для хранения матрицы Q выделяется отдельное место, в начале алгоритма она равна единичной. На k -ом ($k = 1, \dots, n-1$) следует преобразовать ее:

$$Q := Q \prod_{j=n}^{k+1} T_{kj}.$$

Произведение матрицы элементарного вращения на матрицу вычисляется по алгоритму из леммы 5 с затратой $4n$ умножений и $2n$ сложений. Поэтому произведение $n(n-1)/2$ матриц вращения в (3) может быть вычислено за $2n^2(n-1) = 2n^3 + O(n^2)$ мультипликативных и $n^2(n-1) = n^3 + O(n^2)$ аддитивных операций.

2. Как и в первом способе, матрица R хранится на месте верхнего треугольника матрицы A . Для хранения же матрицы Q отдельная память не выделяется. Заметим, что на шаге k , $k = 1, \dots, n-1$ мы использовали $n-k$ элементарных вращений $T_{k,k+1}, \dots, T_{kn}$ и каждая из этих матриц целиком определяется единственным параметром – значением угла $\varphi_{kj} : T_{kj} = T_{kj}(\varphi_{kj})$, $j = k+1, \dots, n$. При этом при преобразовании матрицы на k -ом шаге алгоритма в k -ом столбце матрицы $A^{(k)}$ образовались $n-k$ нулевых элементов $a_{jk}^{(k)} = 0$, $j = k+1, \dots, n$. Поэтому возможно вместо матрицы Q вида (3) хранить на месте нижнего треугольника матрицы A набор параметров, с помощью которых можно вычислять тригонометрические функции углов φ_{ij} , $j < i$, $i = 2, \dots, n$, $j = 1, \dots, n-1$, задающих матрицы T_{ij} . Чтобы не вычислять обратные тригонометрические формулы, храним не значения самих углов, а $\sin \varphi_{ij}$ или $\cos \varphi_{ij}$ – тот, который имеет наименьший модуль. При этом на месте двух младших битов мантииссы этой величины хранятся признак того, что было запомнено: \sin или \cos и знак не запомненной величины. Изменение этих двух битов вносит намного меньшую погрешность, чем та, с которой функции могут быть вычислены. Запоминание значения с меньшим модулем нужно для уменьшения погрешности вычисления по формулам $\cos \varphi_{ij} = \pm \sqrt{1 - \sin^2 \varphi}$ или $\sin \varphi_{ij} = \pm \sqrt{1 - \cos^2 \varphi}$.

Во втором способе хранения матрицы Q не только экономится n^2 памяти, но и $2n^3 + O(n^2)$ умножений и $n^3 + O(n^2)$ сложений на построение матрицы Q . Здесь важно и то, что редко нужно знать матрицу Q саму по себе, обычно требуется ее произведение на вектор или матрицу. Для вычисления произведения Q на некоторую матрицу B произвольного вида требуется $n(n-1)/2$ произведений матриц вращения на B . По лемме 5 на это потребуется $2n^2(n-1)$ умножений (в два раза больше чем в случае с произвольной Q) и $n^2(n-1)$ сложений (столько же). Если таких произведений требуется не много второй способ предпочтительнее первого.

4.5. Оценка количества арифметических операций в алгоритме построения QR -разложения методом вращений

Трудоемкость алгоритма построения QR - разложения складывается из количества арифметических операций, необходимых для проведения алгоритма метода вращений и для построения матрицы Q .

Если для Q используется второй способ хранения, то дополнительных действий для ее построения не потребуется. Следовательно, в этом случае для построения QR -разложения надо выполнить $4n^3/3 + O(n^2)$ мультипликативных и $2n^3/3 + O(n^2)$ аддитивных операций.

Если же для Q используется первый способ хранения, то к этому надо прибавить $2n^3 + O(n^2)$ мультипликативных и $n^3 + O(n^2)$ аддитивных операций (посчитано выше). Итого получается $10n^3/3 + O(n^2)$ мультипликативных и $5n^3/3 + O(n^2)$ аддитивных операций.

Литература

1. Богачев К.Ю. Практикум на ЭВМ. Методы решения линейных систем и нахождения собственных значений. — М.: Мех.-мат. ф-т МГУ, 1998.
2. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение: Пер. с англ. — 2-е, стер. изд. — М.: Мир, 2001. — 575 с., ил.
3. Хорн Р., Джонсон Ч. Матричный анализ. — М.: Мир, 1989. — 655 с.

Материалы на сайте CAT

4. Котов А. Матрицы и действия с ними. — 2004.