Метод Гаусса решения линейной системы с выбором главного элемента по всей матрице

Дубков Семён

27 сентября 2025 г.

1 Постановка задачи

Рассмотрим систему $AX = B$ с матрицей

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

и правой частью

$$B = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

Представим матрицу в виде:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11}^{m\times m} & A_{12}^{m\times m} & \cdots & A_{1,k}^{m\times m} & A_{1,k+1}^{m\times l} \\ A_{21}^{m\times m} & A_{22}^{m\times m} & \cdots & A_{2,k}^{m\times m} & A_{2,k+1}^{m\times l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ A_{k,1}^{m\times m} & A_{k,2}^{m\times m} & \cdots & A_{k,k}^{m\times m} & A_{k,k+1}^{m\times l} \\ A_{k+1,1}^{l\times m} & A_{k+1,2}^{l\times m} & \cdots & A_{k+1,k}^{l\times m} & A_{k+1,k+1}^{l\times l} \end{pmatrix}.$$

Правую часть представим в виде:

$$B = \begin{pmatrix} B_1^{m\times 1} \\ \vdots \\ B_k^{m\times 1} \\ B_{k+1}^{l\times 1} \end{pmatrix}.$$

Исходную матрицу будем хранить в массиве стандартным образом:

$$a[(i-1)\cdot n + (j-1)] = a_{ij}, \quad b[(i-1)] = b_i, \quad i = 1,\dots,n, \quad j = 1,\dots,n.$$

2 Функции get_block(), set_block()

Algorithm 1 Функция get_block(n, m, i, j, a, c, v, h)

// Возвращает блок A_{ij} в матрицу C
// v, h — размеры матрицы C
$k = n/m$
$l = n\%m$
$v = (i < k)?m : l$
$h = (j < k)?m : l$
for $r = 0$ **to** $v - 1$ **do**
    for $s = 0$ **to** $h - 1$ **do**
        $c[r \cdot h + s] = a[(i \cdot m + r) \cdot n + (j \cdot m + s)]$
    end for
end for

Algorithm 2 Функция set_block(n, m, i, j, a, c, v, h)

// Устанавливает значения блока A_{ij} из матрицы C
// v, h — размеры матрицы C
$k = n/m$
$l = n\%m$
$v = (i < k)?m : l$
$h = (j < k)?m : l$
for $r = 0$ **to** $v - 1$ **do**
    for $s = 0$ **to** $h - 1$ **do**
        $a[(i \cdot m + r) \cdot n + (j \cdot m + s)] = c[r \cdot h + s]$
    end for
end for

3 Описание алгоритма

На s-ом шаге алгоритма ищем блок с минимальной нормой обратной матрицы $B_{ij} = A_{ij}^{-1}$ (главный элемент):

$$\|B_{ij}\| = \max_{0 \le r < m} \sum_{t=0}^{m-1} |b_{(i \cdot m + r) \cdot n + j \cdot m + t}|, \; i = s, \dots k, j = s, \dots k.$$

Пусть $A_{i_0 j_0}$ — главный элемент. Переставим его на позицию A_{ss}, переставляя строки и столбцы в матрице и строки в правой части. Запоминаем в массиве перестановку столбцов $p[s] = j_0$. На s-ом шаге получаем матрицу, где T — верхняя треугольная блочная матрица:

$$A = \begin{pmatrix} T & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & A_{ss}^{m \times m} & \cdots & A_{s,k}^{m \times m} & A_{s,k+1}^{m \times l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & A_{k,2}^{m \times m} & \cdots & A_{k,k}^{m \times m} & A_{k,k+1}^{m \times l} \\ 0 & A_{k+1,2}^{l \times m} & \cdots & A_{k+1,k}^{l \times m} & A_{k+1,k+1}^{l \times l} \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} \vdots \\ B_s^{m \times 1} \\ \vdots \\ B_{k+1}^{l \times 1} \end{pmatrix}.$$

Находим обратную матрицу $C^{m \times m} = A_{ss}^{-1}$ и домножаем строку и правую часть на неё слева:

$$A = \begin{pmatrix} T & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & E & \cdots & C^{m \times m} A_{s,k}^{m \times m} & C^{m \times m} A_{s,k+1}^{m \times l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & A_{k,2}^{m \times m} & \cdots & A_{k,k}^{m \times m} & A_{k,k+1}^{m \times l} \\ 0 & A_{k+1,2}^{l \times m} & \cdots & A_{k+1,k}^{l \times m} & A_{k+1,k+1}^{l \times l} \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} \vdots \\ C^{m \times m} B_s^{m \times 1} \\ \vdots \\ B_{k+1}^{l \times 1} \end{pmatrix}.$$

Затем обнуляем столбец, используя элементарные преобразования строк:

$$\widetilde{A}_{ij} = A_{ij} - A_{is}(CA_{sj}), \quad \widetilde{B}_i = B_i - A_{is}(CB_s), \quad i = s+1, \dots k+1, \; j = s+1, \dots k+1.$$

Получаем матрицу:

$$A = \begin{pmatrix} \widetilde{T} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \widetilde{A}_{s+1,s+1}^{m \times m} & \cdots & \widetilde{A}_{s+1,k}^{m \times m} & \widetilde{A}_{s+1,k+1}^{m \times l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \widetilde{A}_{k,2}^{m \times m} & \cdots & \widetilde{A}_{k,k}^{m \times m} & \widetilde{A}_{k,k+1}^{m \times l} \\ 0 & \widetilde{A}_{k+1,2}^{l \times m} & \cdots & \widetilde{A}_{k+1,k}^{l \times m} & \widetilde{A}_{k+1,k+1}^{l \times l} \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} \vdots \\ B_s^{m \times 1} \\ \widetilde{B}_{s+1}^{m \times 1} \\ \vdots \\ \widetilde{B}_{k+1}^{l \times 1} \end{pmatrix},$$

где матрица $\widetilde{T}$ имеет вид:

$$\widetilde{T} = \begin{pmatrix} T & \cdots \\ 0 & E \end{pmatrix}.$$

По индукции получаем верхнюю треугольную матрицу:

$$A = \begin{pmatrix} E^{m \times m} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & E^{m \times m} & \cdots & A_{s+1,k}^{m \times m} & A_{s+1,k+1}^{m \times l} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & 0 & \cdots & E^{m \times m} & A_{k,k+1}^{m \times l} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & E^{l \times l} \end{pmatrix}, \; B = \begin{pmatrix} B_1^{m \times 1} \\ \vdots \\ B_k^{m \times 1} \\ B_{k+1}^{l \times 1} \end{pmatrix}.$$

Теперь проведём обратный ход, записывая ответ в вектор X:

$$
\begin{aligned}
X_{p[k+1]} &= B_{k+1}, \\
X_{p[k]} &= B_k - A_{k,k+1}X_{p[k+1]}, \\
X_{p[k-1]} &= B_{k-1} - A_{k-1,k+1}X_{p[k+1]} - A_{k-1,k}X_{p[k]}, \\
&\dots \\
X_{p[j]} &= B_j - \sum_{i=0}^{k-j} A_{j,k+1-i}X_{p[k+1-i]}.
\end{aligned}
$$

Algorithm 3 Основной цикл, s-ый шаг

$swap(A_{ss}, A_{i_0 j_0})$
// Меняем 1-ю и i_0-ю строки в матрице и правой части, а также 1-й и j_0-й столбцы матрицы
// (имеются в виду строки и столбцы блоков)
$p[s] = j_0$ // Запоминаем перестановку столбцов
$C \leftarrow get\_block(A_{ss})$
$B \leftarrow inverse(C)$
// Если обратной матрицы не существует, программа завершается
for $i = s+1$ to k do
    $G \leftarrow get\_block(A_{si})$
    $D \leftarrow mult(B,\ G)$ // Умножение матриц $m \times m \times m \times m$
    $set\_block(A_{si},\ D)$
end for
$C \leftarrow get\_block(A_{s,k+1})$
$D \leftarrow mult(B,\ C)$ // Умножение матриц $m \times m \times m \times l$
$set\_block(A_{s,k+1},\ D)$
// bl = k, если l==0, иначе k+1
for $i = s+1$ to bl do
    $C \leftarrow get\_block(A_{is})$
    for $j = s+1$ to bl do
        $D \leftarrow get\_block(A_{sj})$
        $F \leftarrow get\_block(A_{ij})$
        $M \leftarrow mult(C,\ D)$
        $G \leftarrow sub(F,\ M)$ // Вычитание матриц
        $set\_block(A_{ij},\ G)$
    end for
end for
// Если i=k+1 или j=k+1, цикл корректно обрабатывается

4 Сложность алгоритма

Алгоритм зависит от двух параметров n и m. Сложность выражается как:

$$S(n,m) = c_1 n^3 + c_2 m^3 + c_3 n^2 m + c_4 n m^2 + O(n^2 + nm + m^2).$$

Требуется найти константы c_1, c_2, c_3, c_4. Заметим, что перестановка строк, столбцов и обратный ход дают вклад $O(n^2+nm+m^2)$. Положим $k = \frac{n}{m}$.

4.1 Поиск главного элемента

$$m^3 \sum_{s=1}^{k} (k-s+1)^2 = m^3 \frac{k(k+1)(2k+1)}{6} = \frac{n(n+m)(2n+m)}{6} = \frac{(n^2+nm)(2n+m)}{6}$$
$$= \frac{2n^3 + n^2 m + 2n^2 m + nm^2}{6} = \frac{1}{3}n^3 + \frac{1}{2}n^2 m + \frac{1}{6}nm^2.$$

4.2 Обращение главного элемента

$$m^3 \sum_{s=1}^{k} 1 = m^3 k = m^2 n.$$

4.3 Домножение на строку

$$2m^3 \sum_{s=1}^{k} (k-s) = 2m^3 \frac{(k-1)k}{2} = m(n-m)n = mn^2 - m^2 n.$$

4.4 Обнуление столбца

$$2m^3 \sum_{s=1}^{k} (k-s)^2 = 2m^3 \frac{k(k-1)(2k-1)}{6} = \frac{1}{3}n(n-m)(2n-m) = \frac{1}{3}(n^2-nm)(2n-m)$$
$$= \frac{1}{3}(2n^3 - n^2 m - 2n^2 m + nm^2) = \frac{2}{3}n^3 - n^2 m + \frac{1}{3}nm^2.$$

Итоговая сложность:

$$S(n,m) = n^3 + \frac{1}{2}n^2 m + \frac{1}{2}nm^2 + O(n^2+nm+m^2).$$

Проверка: $S(n,1) = S(n)$, $S(n,n) = S(n) + n^3$.