Вычислительная математика.

Прямые методы решения систем линейных уравнений.

МФТИ

Содержание

- LU-разложение и метод Гаусса
- Метод Холецкого
- **◎** QR-разложение
- Метод наименьших квадратов

Метод Гаусса

Метод Гаусса

• Исключение неизвестных:

$$+ \left\{ \times - \frac{a_{21}}{a_{11}} \quad \left[\begin{array}{ccc} a_{11} & a_{12} & \dots \\ \hline a_{21} & a_{22} & \dots \end{array} \right] \right.$$

Метод Гаусса

• Исключение неизвестных:

$$+ \left\{ \begin{array}{cccc} \times & -\frac{a_{21}}{a_{11}} & \left[\begin{array}{cccc} a_{11} & a_{12} & \dots \\ \hline a_{21} & a_{22} & \dots \end{array} \right] \right.$$

 Один шаг исключения – умножение слева на нижнетреугольную матрицу L

$$A_1 = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 & \dots \\ & & \ddots & \end{bmatrix}}_{\mathsf{A}} \times A$$

• Основная идея: с помощью операций со строками привести матрицу к верхнетреугольному виду:

 Основная идея: с помощью операций со строками привести матрицу к верхнетреугольному виду:

 Основная идея: с помощью операций со строками привести матрицу к верхнетреугольному виду:

•
$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = U$$
, $L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}$, $A = LU$

 Основная идея: с помощью операций со строками привести матрицу к верхнетреугольному виду:

•
$$L_{n-1} \dots L_2 L_1 A = U, L = L_1^{-1} L_2^{-1} \dots L_{n-1}^{-1}, A = LU$$

• Могли столкнуться с делением на 0!

• L_1L_2 – нижнетреугольная матрица.

• L_1L_2 – нижнетреугольная матрица.

$$(L_1L_2)_{ij} = \sum_{k=1}^n I_{ik}^1 I_{k_j}^2 = \sum_{k \le i, k \ge j} I_{ik}^1 I_{k_j}^2 \stackrel{i \le j}{=} 0$$

• L_1L_2 — нижнетреугольная матрица.

$$(L_1L_2)_{ij} = \sum_{k=1}^n I_{ik}^1 I_{k_j}^2 = \sum_{k \le i, k \ge j} I_{ik}^1 I_{k_j}^2 \stackrel{i \le j}{=} 0$$

• L^{-1} – нижнетреугольная матрица.

• L_1L_2 – нижнетреугольная матрица.

$$(L_1L_2)_{ij} = \sum_{k=1}^n I_{ik}^1 I_{k_j}^2 = \sum_{k \le i, k \ge j} I_{ik}^1 I_{k_j}^2 \stackrel{i \le j}{=} 0$$

ullet L^{-1} – нижнетреугольная матрица. По правилу Крамера: $(L^{-1})_{ij} = rac{\Delta_{ij}}{\Delta}$

• L_1L_2 – нижнетреугольная матрица.

$$(L_1L_2)_{ij} = \sum_{k=1}^n I_{ik}^1 I_{k_j}^2 = \sum_{k \le i, k \ge j} I_{ik}^1 I_{k_j}^2 \stackrel{i \le j}{=} 0$$

• L^{-1} – нижнетреугольная матрица. По правилу Крамера: $(L^{-1})_{ij} = \frac{\Delta_{ij}}{\Delta}$

$$i < j: \Delta_{ij} = \begin{vmatrix} x & & & & \\ x & x & & & \\ x & x & 0 & & \\ x & x & 1 & x \end{vmatrix} = 0$$

Матрицы $\overline{L_k}$

Матрицы ${\it L}_{\it k}$

$$x_{k} = \begin{bmatrix} x_{1k} \\ \vdots \\ x_{kk} \\ x_{k+1,k} \\ \vdots \\ x_{nk} \end{bmatrix},$$

$$x_{k} = \begin{bmatrix} x_{1k} \\ \vdots \\ x_{kk} \\ x_{k+1,k} \\ \vdots \\ x_{nk} \end{bmatrix}, L_{k}x_{k} = \begin{bmatrix} x_{1k} \\ \vdots \\ x_{kk} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$x_k = \left[egin{array}{c} x_{1k} \\ \vdots \\ x_{kk} \\ x_{k+1,k} \\ \vdots \\ x_{nk} \end{array}
ight], L_k x_k = \left[egin{array}{c} x_{1k} \\ \vdots \\ x_{kk} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}
ight]$$
 нужно вычесть из j -й строки k -ю строку, умноженную на $I_{jk} = rac{x_{jk}}{x_{kk}} \quad k < j \leq n$

нужно вычесть из i-й

$$I_{jk} = \frac{x_{jk}}{x_{kk}} \quad k < j \le r$$

$$x_k = \left[egin{array}{c} x_{1k} \\ \vdots \\ x_{kk} \\ x_{k+1,k} \\ \vdots \\ x_{nk} \end{array}
ight], L_k x_k = \left[egin{array}{c} x_{1k} \\ \vdots \\ x_{kk} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{array}
ight]$$
 нужно вычесть из j -й строки k -ю строку, умноженную на $I_{jk} = rac{x_{jk}}{x_{kk}} \quad k < j \leq n$

нужно вычесть из i-й

$$I_{jk} = \frac{x_{jk}}{x_{kk}} \quad k < j \le n$$

Матрицы $\overline{L_k}$

$$L_{k} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -I_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -I_{nk} & & & 1 \end{bmatrix}, \ I_{k} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ I_{k+1,k} \\ \vdots \\ I_{n,k} \end{bmatrix}$$

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & & 1 \end{bmatrix}, \ l_k = \begin{bmatrix} 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \\ l_{k+1,k} & & \vdots & \\ \vdots & & & \\ l_{n,k} & & \end{bmatrix}$$

• $L_k = I - I_k e_k^T$

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & & 1 \end{bmatrix}, \ l_k = \begin{bmatrix} 0 & & \\ \vdots & & \\ 0 & & \\ l_{k+1,k} & & \\ \vdots & & \\ l_{n,k} \end{bmatrix}$$

•
$$L_k = I - I_k e_k^T$$

•
$$(I - I_k e_k^T)(I + I_k e_k^T) = I - I_k (e_k^T I_k) e_k^T = I$$

$$L_k = \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -I_{k+1,k} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & & -I_{nk} & & & 1 \end{bmatrix}, \ I_k = \begin{bmatrix} 0 & & \\ \vdots & & \\ 0 & & \\ I_{k+1,k} & & \\ \vdots & & \\ I_{n,k} \end{bmatrix}$$

•
$$L_k = I - I_k e_k^T$$

•
$$(I - I_k e_k^T)(I + I_k e_k^T) = I - I_k (e_k^T I_k) e_k^T = I$$

$$\bullet \ L_k^{-1} = I + I_k e_k^T$$

$$L_k = \left[egin{array}{ccccc} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{k+1,k} & 1 & & \\ & & dots & \ddots & \\ & & -l_{nk} & & 1 \end{array}
ight], \ l_k = \left[egin{array}{c} 0 & & & \\ dots & 0 & & \\ l_{k+1,k} & & & \\ dots & & & \\ dots & & & \\ l_{n,k} \end{array}
ight]$$

•
$$L_k = I - I_k e_k^T$$

•
$$(I - I_k e_k^T)(I + I_k e_k^T) = I - I_k (e_k^T I_k) e_k^T = I$$

•
$$L_k^{-1} = I + I_k e_k^T$$

•
$$L_k^{-1}L_{k+1}^{-1} = (I + I_k e_k^T)(I + I_{k+1}e_{k+1}^T) = I + I_k e_k^T + I_{k+1}e_{k+1}^T + I_k e_k^T + I_{k+1}e_{k+1}^T = I + I_k e_k^T + I_{k+1}e_{k+1}^T$$

Алгоритм LU-разложения без перестановок

Алгоритм LU-разложения без перестановок

$$L = L_1^{-1} \dots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ I_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ I_{n1} & \cdots & I_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

Алгоритм LU-разложения без перестановок

$$L = L_1^{-1} \dots L_{n-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ I_{21} & 1 & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ I_{n1} & \cdots & I_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}$$

Алгоритм:

```
 \begin{array}{l} U = A \\ L = I \\ \text{for } k = 1, \ n-1 \\ & \text{for } j = k\!+\!1, \ n \\ & 1[j,k] = u[j,k]/u[k,k] \\ & u[j,k:n] = u[j,k:n] - 1[j,k] * u[k,k:n] \end{array}
```

```
 \begin{array}{l} U = A \\ L = I \\ \text{for } k = 1, \ n-1 \\ & \text{for } j = k+1, \ n \\ & 1[j,k] = u[j,k]/u[k,k] \\ & u[j,k:n] = u[j,k:n] - 1[j,k] * u[k,k:n] \end{array}
```

$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=k+1}^{n} 2(n-k+1) =$$

```
 \begin{array}{l} U = A \\ L = I \\ \text{for } k = 1, \ n-1 \\ & \text{for } j = k\!+\!1, \ n \\ & 1[j,k] = u[j,k]/u[k,k] \\ & u[j,k:n] = u[j,k:n] - 1[j,k] \ * \ u[k,k:n] \end{array}
```

$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=k+1}^{n} 2(n-k+1) = \sum_{k=1}^{n-1} 2(n-k+1)(n-k) \stackrel{q=n-k}{=}$$

$$\begin{array}{l} U = A \\ L = I \\ \text{for } k = 1, \ n-1 \\ & \text{for } j = k+1, \ n \\ & 1[j,k] = u[j,k]/u[k,k] \\ & u[j,k:n] = u[j,k:n] - 1[j,k] * u[k,k:n] \end{array}$$

$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=k+1}^{n} 2(n-k+1) = \sum_{k=1}^{n-1} 2(n-k+1)(n-k) \stackrel{q=n-k}{=}$$

$$\sum_{q=1}^{n-1} 2(q+1)q = 2\sum_{q=1}^{n-1} q^2 + 2\sum_{q=1}^{n-1} q =$$

$$\begin{array}{l} U = A \\ L = I \\ \text{for } k = 1, \ n-1 \\ & \text{for } j = k\!+\!1, \ n \\ & 1[j,k] = u[j,k]/u[k,k] \\ & u[j,k:n] = u[j,k:n] - 1[j,k] * u[k,k:n] \end{array}$$

$$\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=k+1}^{n} 2(n-k+1) = \sum_{k=1}^{n-1} 2(n-k+1)(n-k) \stackrel{q=n-k}{=}$$

$$\sum_{q=1}^{n-1} 2(q+1)q = 2\sum_{q=1}^{n-1} q^2 + 2\sum_{q=1}^{n-1} q =$$

$$= 2\frac{(n-1)n(2n-1)}{6} + O(n^2) = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2) = \Theta$$

Программа для вычисления LU-разложения без перестановок (демо)

Существование LU-разложения

Существование LU-разложения

• Алгоритм построен в предположении, что $u_{kk} \neq 0$

$\overline{\mathsf{C}\mathsf{y}\mathsf{u}\mathsf{e}\mathsf{c}\mathsf{r}\mathsf{g}\mathsf{e}\mathsf{s}\mathsf{e}\mathsf{h}\mathsf{u}\mathsf{e}}$

• Алгоритм построен в предположении, что $u_{kk} \neq 0$

Существование LU-разложения

- Алгоритм построен в предположении, что $u_{kk} \neq 0$
- 0. 1. 1. 1.

Определение 6.1 Строго регулярная матрица

Матрица называется *строго регулярной*, если все её ведущие подматрицы невырожденные.

Существование LU-разложения

- Алгоритм построен в предположении, что $u_{kk} \neq 0$
- 0. 1. 1. 1.

Определение 6.1 Строго регулярная матрица

Матрица называется *строго регулярной*, если все её ведущие подматрицы невырожденные.

Теорема $6.1 \, LU$ -разложение

A имеет LU-разложение \iff A строго регулярная.

• *LU*-разложение определяется однозначно:

Допустим
$$L_1U_1=L_2U_2$$
, тогда $L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}=D,\Rightarrow$ D - диагональная, $D=I$, т.е. $L_1=L_2$, $U_1=U_2$

• LU-разложение определяется однозначно:

Допустим
$$L_1U_1=L_2U_2$$
, тогда $L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}=D,\Rightarrow$ D - диагональная, $D=I$, т.е. $L_1=L_2$, $U_1=U_2$

• Все ведущие миноры положительны \Leftrightarrow все диагональные элементы U>0

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & & \\ x & \ddots & & & \\ \vdots & & 1 & & \\ & & & \ddots & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & x & \dots & & \\ 0 & \ddots & & & \\ \vdots & & u_{kk} & & & \\ & & & \ddots & & \end{bmatrix}$$

• *LU*-разложение определяется однозначно:

Допустим
$$L_1U_1=L_2U_2$$
, тогда $L_2^{-1}L_1=U_2U_1^{-1}=D,\Rightarrow$ D - диагональная, $D=I$, т.е. $L_1=L_2$, $U_1=U_2$ \square

• Все ведущие миноры положительны \Leftrightarrow все диагональные элементы U>0

$$A = LU = egin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & & & & \\ x & \ddots & & & & & \\ \vdots & & 1 & & & & \\ & & & \ddots & & & \\ & & & & \ddots & \end{bmatrix} egin{bmatrix} u_{11} & x & \dots & & \\ 0 & \ddots & & & \\ \vdots & & u_{kk} & & & \\ & & & \ddots & \end{bmatrix}$$

$$\det A_{1:k,1:k} = \det L_{1:k,1:k} \det U_{1:k,1:k} = \prod_{i=1}^{k} u_{ii}$$

• Если $A = A^*$, то

$$A = LU = L \begin{bmatrix} u_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & u_{nn} \end{bmatrix} \tilde{U} = LD\tilde{U} = \tilde{U}^*(D^*L^*)$$

из единственности LU: $ilde{U}^* = L$, $A = LDL^*$, $u_{ii} \in \mathbb{R}$

• Если $A = A^*$, то

$$A = LU = L \begin{bmatrix} u_{11} & & \\ & \ddots & \\ & & u_{nn} \end{bmatrix} \tilde{U} = LD\tilde{U} = \tilde{U}^*(D^*L^*)$$

из единственности LU: $ilde{U}^*=L$, $A=LDL^*$, $u_{ii}\in\mathbb{R}$

• Если $A = A^* > 0$, то существует разложение Холецкого:

$$A = LDL^* = (LD^{1/2})(D^{1/2}L^*) = CC^*$$

C - нижнетреугольная, $C_{ii} > 0$.

• Пусть t - длина мантиссы

$$A = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \tilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2^t & 1 \end{bmatrix} \tilde{U} = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 0 & 1 - 2^t \end{bmatrix}$$
$$\tilde{L}\tilde{U} = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = A + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

• Пусть t - длина мантиссы

$$A = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \tilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2^t & 1 \end{bmatrix} \tilde{U} = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 0 & \cancel{1} - 2^t \end{bmatrix}$$
$$\tilde{L}\tilde{U} = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = A + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

• Малая величина диагонального элемента, на который мы делим, приводит к росту элементов в L и U.

• Пусть t - длина мантиссы

$$A = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \tilde{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2^t & 1 \end{bmatrix} \tilde{U} = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 0 & 1 - 2^t \end{bmatrix}$$
$$\tilde{L}\tilde{U} = \begin{bmatrix} 2^{-t} & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = A + \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

- Малая величина диагонального элемента, на который мы делим, приводит к росту элементов в L и U.
- Решение: на каждом шаге выбирать ведущий элемент (pivot) из подматрицы: максимальный по модулю элемент в столбце/строке/подматрице.

Выбор по столбцу (partial pivoting):

Выбор по столбцу (partial pivoting):

• выбираем максимальный по модулю элемент в столбце

Выбор по столбцу (partial pivoting):

- выбираем максимальный по модулю элемент в столбце
- меняем его строку с текущей строкой

Выбор по столбцу (partial pivoting):

- выбираем максимальный по модулю элемент в столбце
- меняем его строку с текущей строкой

$$\begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & x_{ik} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ 0 & \times & \times & \times \end{bmatrix} \xrightarrow{P} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & x_{ik} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ 0 & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ 0 & \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

$$\xrightarrow{L} \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \mathbf{x}_{ik} & \times & \times \\ 0 & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ 0 & \mathbf{0} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{bmatrix}$$

•
$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_2P_2L_1P_1A = U$$
 P_k - матрица перестановки, $P_k^{-1} = P_k^T$

•
$$L_{n-1}P_{n-1}\cdots L_2P_2L_1P_1A = U$$

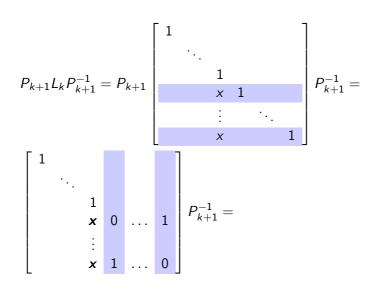
 P_k - матрица перестановки, $P_k^{-1} = P_k^T$

•

$$L_3P_3L_2P_2L_1P_1 = L_3(P_3L_2P_3^{-1})(P_3P_2L_1P_2^{-1}P_3^{-1})P_3P_2P_1 = L_3'L_2'L_1'P_3P_2P_1$$

где
$$L_3'=L_3,\; L_2'=P_3L_2P_3^{-1},\; L_1'=P_3P_2L_1P_2^{-1}P_3^{-1}$$

$$P_{k+1}L_kP_{k+1}^{-1} =$$



$$P_{k+1}L_{k}P_{k+1}^{-1} = P_{k+1}\begin{bmatrix} 1 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 1 & & \\ & & x & 1 & \\ & & \vdots & \ddots & \\ & & x & 1 & \end{bmatrix} P_{k+1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & x & 1 & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \dots & 0 \end{bmatrix} P_{k+1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & 1 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & 1 & \\ & & & \ddots & \\ & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

•
$$L'_{n-1} \dots L'_1 P_{n-1} \dots P_1 A = U \Rightarrow PA = LU$$

- $L'_{n-1} \dots L'_1 P_{n-1} \dots P_1 A = U \Rightarrow PA = LU$
- Выбор главного элемента по столбцу добавляет $O(n^2)$ операций сложность $\approx \frac{2}{3} n^3$

- $L'_{n-1} \dots L'_1 P_{n-1} \dots P_1 A = U \Rightarrow PA = LU$
- Выбор главного элемента по столбцу добавляет $O(n^2)$ операций сложность $\approx \frac{2}{3}n^3$

```
U = A, L = I, P = I
for k = 1, n-1
    i = argmax(|u[k:n,k]|)
    u[k,k:n] <-> u[i,k:n]
    l[k,1:k-1] <-> l[i,1:k-1]
    p[k,:] <-> p[i,:]
    for j = k + 1, n
        l[j,k] = u[j,k]/u[k,k]
        u[j,k:n] = u[j,k:n] - l[j,k] * u[k,k:n]
```

Процесс решения системы Ax=b можно разделить на 3 этапа

Процесс решения системы Ax=b можно разделить на 3 этапа

 $lacksymbol{0}$ Вычисление LU разложения PA=LU (далее A=LU) – $O(n^3)$

Процесс решения системы Ax=b можно разделить на 3 этапа

- lacktriangledown Вычисление LU разложения PA=LU (далее A=LU) $O(n^3)$
- **2** Решение системы Ly = b (прямая подстановка) $O(n^2)$

Процесс решения системы Ax=b можно разделить на 3 этапа

- lacktriangledown Вычисление LU разложения PA=LU (далее A=LU) $O(n^3)$
- **2** Решение системы Ly = b (прямая подстановка) $O(n^2)$
- **3** Решение системы Ux = y (обратная подстановка) $O(n^2)$

Решение системы с помощью LU разложения

Процесс решения системы Ax=b можно разделить на 3 этапа

- lacktriangledown Вычисление LU разложения PA=LU (далее A=LU) $O(n^3)$
- **2** Решение системы Ly = b (прямая подстановка) $O(n^2)$
- **3** Решение системы Ux = y (обратная подстановка) $O(n^2)$

Для разных b достаточно вычислить LU-разложение только 1 раз!

Алгоритм прямой подстановки Ly = b:

```
y[:] = 0
for k = 1, n
    y[k] = b[k]
    for i = 1, k-1
        y[k] = y[k] - y[i] * l[k,i]
    y[k] = y[k] / l[k,k]
```

Алгоритм прямой подстановки Ly = b:

С использованием скалярного произведения:

```
y[:] = 0
for k = 1, n
y[k] = (b[k] - \langle y[1:k-1], 1[k,1:k-1] \rangle / 1[k,k]
```

Алгоритм прямой подстановки Ly = b:

С использованием скалярного произведения:

```
y[:] = 0 for k = 1, n y[k] = (b[k] - \langle y[1:k-1], 1[k,1:k-1] \rangle / 1[k,k] Количество операций: n^2 + O(n)
```

• При выборе в столбце возможен рост элементов U:

$$\frac{\max_{i,j}|u_{ij}|}{\max_{i,j}|a_{ij}|} \le 2^{n-1}$$

Оценка достигается на специально подобранных матрицах

• При выборе в столбце возможен рост элементов U:

$$\frac{\max_{i,j}|u_{ij}|}{\max_{i,j}|a_{ij}|} \le 2^{n-1}$$

Оценка достигается на специально подобранных матрицах

• На практике сильный рост не встречается!

• При выборе в столбце возможен рост элементов U:

$$\frac{\max_{i,j}|u_{ij}|}{\max_{i,j}|a_{ij}|} \le 2^{n-1}$$

Оценка достигается на специально подобранных матрицах

• На практике сильный рост не встречается!

In fifty years of computing, no matrix problem that excite an explosive instability are known to have arisen under natural circumstances.

Trefethen L. N., Bau III D. Numerical linear algebra. – Siam, 1997

• $A = A^T > 0$: $A = CC^T$, C – нижнетреугольная с положительной диагональю.

- $A = A^T > 0$: $A = CC^T$, C нижнетреугольная с положительной диагональю.
- Для n = 3:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & 0 & 0 \\ c_{21} & c_{22} & 0 \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} \\ 0 & c_{22} & c_{21} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{bmatrix}$$

- $A = A^T > 0$: $A = CC^T$, C нижнетреугольная с положительной диагональю.
- Для n = 3:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & 0 & 0 \\ c_{21} & c_{22} & 0 \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} \\ 0 & c_{22} & c_{21} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{bmatrix}$$

• Последовательно будем вычислять элементы C:

$$\begin{array}{ll} c_{11} = \sqrt{a_{11}} & c_{21} = \frac{a_{21}}{c_{11}} & c_{31} = \frac{a_{31}}{c_{11}} \\ c_{22} = \sqrt{a_{22} - c_{21}^2} & c_{32} = \frac{a_{32} - c_{31}c_{21}}{c_{22}} \\ c_{33} = \sqrt{a_{33} - c_{31}^2 - c_{32}^2} & \end{array}$$

- $A = A^T > 0$: $A = CC^T$, C нижнетреугольная с положительной диагональю.
- Для n = 3:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & 0 & 0 \\ c_{21} & c_{22} & 0 \\ c_{31} & c_{32} & c_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_{11} & c_{21} & c_{31} \\ 0 & c_{22} & c_{21} \\ 0 & 0 & c_{33} \end{bmatrix}$$

• Последовательно будем вычислять элементы С:

$$\begin{array}{ll} c_{11} = \sqrt{a_{11}} & c_{21} = \frac{a_{21}}{c_{11}} & c_{31} = \frac{a_{31}}{c_{11}} \\ c_{22} = \sqrt{a_{22} - c_{21}^2} & c_{32} = \frac{a_{32} - c_{31}c_{21}}{c_{22}} \\ c_{33} = \sqrt{a_{33} - c_{31}^2 - c_{32}^2} & \end{array}$$

• Решение линейной системы: Ax = b: $A = CC^T$, $CC^Tx = b \rightarrow Cy = b \rightarrow C^Tx = y$.

```
 C = 0  for k = 1, n   c[k,k] = (a[k,k] - sum(c[k,1:k-1]^2))^1/2  for i = k+1, n   c[i,k] = a[i,k] - sum(c[i,1:k-1] * c[k,1:k-1])   c[i,k] = c[i,k] / c[k,k]
```

$$\begin{array}{l} {\tt C} = 0 \\ {\tt for} \ k = 1, \ n \\ {\tt c[k,k]} = (a[k,k] - sum(c[k,1:k-1]^2))^1/2 \\ {\tt for} \ i = k+1, \ n \\ {\tt c[i,k]} = a[i,k] - sum(c[i,1:k-1] * c[k,1:k-1]) \\ {\tt c[i,k]} = c[i,k] / c[k,k] \\ \end{array}$$

• Количество операций

$$\sum_{k=1}^{n} \left(2k + \sum_{i=k+1}^{n} 2k \right) = \sum_{k=1}^{n} \left(2k + 2k(n-k) \right) =$$
$$(n+1)n + n^{2}(n+1) - 2\frac{n(n+1)(2n+1)}{6} = \frac{1}{3}n^{3} + O(n^{2})$$

$$C = 0$$
 for $k = 1$, n
$$c[k,k] = (a[k,k] - sum(c[k,1:k-1]^2))^1/2$$
 for $i = k+1$, n
$$c[i,k] = a[i,k] - sum(c[i,1:k-1] * c[k,1:k-1])$$

$$c[i,k] = c[i,k] / c[k,k]$$

• Количество операций

$$\sum_{k=1}^{n} \left(2k + \sum_{i=k+1}^{n} 2k \right) = \sum_{k=1}^{n} \left(2k + 2k(n-k) \right) =$$
$$(n+1)n + n^{2}(n+1) - 2\frac{n(n+1)(2n+1)}{6} = \frac{1}{3}n^{3} + O(n^{2})$$

• В методе Холецкого нет роста элементов!

ullet Пусть $A\in\mathbb{C}^{m imes n},\ m\geq n,\ A=[a_1|a_2|\dots|a_n]$

- Пусть $A \in \mathbb{C}^{m \times n}, \ m \geq n, \ A = [a_1 | a_2 | \dots | a_n]$
- Применим ортогонализацию Грамма-Шмидта:

- Пусть $A \in \mathbb{C}^{m \times n}, \ m \geq n, \ A = [a_1|a_2|\dots|a_n]$
- Применим ортогонализацию Грамма-Шмидта:

$$q_1 \equiv a_1/\|a_1\|_2$$

- Пусть $A \in \mathbb{C}^{m \times n}, \ m \geq n, \ A = [a_1|a_2|\dots|a_n]$
- Применим ортогонализацию Грамма-Шмидта:
 - $q_1 \equiv a_1/\|a_1\|_2$
 - ② $p_2 = a_2 (a_2, q_1)q_1$, $q_2 = p_2/\|p_2\|_2$ (нормировка)

- ullet Пусть $A\in\mathbb{C}^{m imes n},\ m\geq n,\ A=[a_1|a_2|\dots|a_n]$
- Применим ортогонализацию Грамма-Шмидта:
 - $q_1 \equiv a_1/\|a_1\|_2$
 - 2 $p_2 = a_2 (a_2, q_1)q_1$, $q_2 = p_2/\|p_2\|_2$ (нормировка)

- ullet Пусть $A\in\mathbb{C}^{m imes n},\ m\geq n,\ A=[a_1|a_2|\dots|a_n]$
- Применим ортогонализацию Грамма-Шмидта:
 - $q_1 \equiv a_1/\|a_1\|_2$
 - 2 $p_2 = a_2 (a_2, q_1)q_1$, $q_2 = p_2/\|p_2\|_2$ (нормировка)
- k-й столбец A есть линейная комбинация q_1, \ldots, q_k . В матричном виде:

- ullet Пусть $A\in\mathbb{C}^{m imes n},\ m\geq n$, $A=[a_1|a_2|\dots|a_n]$
- Применим ортогонализацию Грамма-Шмидта:
 - $q_1 \equiv a_1/\|a_1\|_2$
 - 2 $p_2 = a_2 (a_2, q_1)q_1$, $q_2 = p_2/\|p_2\|_2$ (нормировка)
- k-й столбец A есть линейная комбинация q_1, \ldots, q_k . В матричном виде:

$$\left[\begin{array}{c|c} a_1 & \dots & a_n \end{array}\right] = \underbrace{\left[\begin{array}{c|c} q_1 & \dots & q_n \end{array}\right]}_{Q} \underbrace{\left[\begin{array}{ccc} r_{11} & \dots & \times \\ 0 & \ddots & \times \\ 0 & \dots & r_{nn} \end{array}\right]}_{R} = QR$$

```
for j = 1, k
    p[:,j] = a[:,j]
    for i = 1, j - 1
        p[:,j] = p[:,j] - q[:,i] * <a[:,j], q[:,i]>
    q[:,j] = p[:,j] / ||p[:,j]||_2
```

```
for j = 1, k
    p[:,j] = a[:,j]
    for i = 1, j - 1
        p[:,j] = p[:,j] - q[:,i] * <a[:,j], q[:,i]>
    q[:,j] = p[:,j] / ||p[:,j]||_2
```

• В стандартном алгоритме происходит *потеря ортогональности*

```
for j = 1, k
   p[:,j] = a[:,j]
   for i = 1, j - 1
        p[:,j] = p[:,j] - q[:,i] * <a[:,j], q[:,i]>
   q[:,j] = p[:,j] / ||p[:,j]||_2
```

- В стандартном алгоритме происходит *потеря ортогональности*
- На практике используют модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта:

```
for j = 1, k
   p[:,j] = a[:,j]
   for i = 1, j - 1
        p[:,j] = p[:,j] - q[:,i] * <a[:,j], q[:,i]>
   q[:,j] = p[:,j] / ||p[:,j]||_2
```

- В стандартном алгоритме происходит *потеря ортогональности*
- На практике используют модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта:

```
for j = 1, k
    p[:,j] = a[:,j]
    for i = 1, j - 1
        p[:,j] = p[:,j] - q[:,i] * <p[:,j], q[:,i]>
    q[:,j] = p[:,j] / ||p[:,j]||_2
```

• Можно решить систему Ax = b в 3 шага

$$Q^*(QR)x = Q^*b \Rightarrow Rx = Q^*b = y$$

• Можно решить систему Ax = b в 3 шага

$$Q^*(QR)x = Q^*b \Rightarrow Rx = Q^*b = y$$

1 A = QR - вычисляем разложение $(O(n^3))$

• Можно решить систему Ax = b в 3 шага

$$Q^*(QR)x = Q^*b \Rightarrow Rx = Q^*b = y$$

- **1** A = QR вычисляем разложение $(O(n^3))$
- **2** вычисляем $y = Q^*b(O(n^2))$

• Можно решить систему Ax = b в 3 шага

$$Q^*(QR)x = Q^*b \Rightarrow Rx = Q^*b = y$$

- **1** A = QR вычисляем разложение $(O(n^3))$
- **2** вычисляем $y = Q^*b(O(n^2))$
- $\mathbf{S} = R^{-1}y$ решаем систему с треугольной матрицей за $O(n^2)$

Решение линейной системы с помощью QR-разложения

• Можно решить систему Ax = b в 3 шага

$$Q^*(QR)x = Q^*b \Rightarrow Rx = Q^*b = y$$

- **1** A = QR вычисляем разложение $(O(n^3))$
- **2** вычисляем $y = Q^*b (O(n^2))$
- $x = R^{-1}y$ решаем систему с треугольной матрицей за $O(n^2)$
- ullet В 2 раза больше вычислений, чем LU разложение

Решение линейной системы с помощью QR-разложения

• Можно решить систему Ax = b в 3 шага

$$Q^*(QR)x = Q^*b \Rightarrow Rx = Q^*b = y$$

- **1** A = QR вычисляем разложение $(O(n^3))$
- ② вычисляем $y = Q^*b(O(n^2))$
- $\mathbf{S} = R^{-1}y$ решаем систему с треугольной матрицей за $O(n^2)$
- \bullet В 2 раза больше вычислений, чем LU разложение
- В QR разложении нет проблем, связанных с ростом элементов

Решение линейной системы с помощью QR-разложения

• Можно решить систему Ax = b в 3 шага

$$Q^*(QR)x = Q^*b \Rightarrow Rx = Q^*b = y$$

- **1** A = QR вычисляем разложение $(O(n^3))$
- **2** вычисляем $y = Q^*b(O(n^2))$
- $\mathbf{S} = R^{-1}y$ решаем систему с треугольной матрицей за $O(n^2)$
- \bullet В 2 раза больше вычислений, чем LU разложение
- В QR разложении нет проблем, связанных с ростом элементов
- ullet Матрицы Q,R содержат дополнительную информацию

• Ax = b, $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, m > n, rank(A) = n

- Ax = b, $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, m > n, rank(A) = n
- В общем случае система не имеет решения: $Ax = b \iff b \in Lin\{a_1, ..., a_n\}$

- Ax = b, $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, m > n, rank(A) = n
- В общем случае система не имеет решения: $Ax = b \iff b \in Lin\{a_1, ..., a_n\}$
- Естественное обобщение: $||r|| = ||Ax b|| \rightarrow \min$

- Ax = b, $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, m > n, rank(A) = n
- В общем случае система не имеет решения: $Ax = b \iff b \in Lin\{a_1, ..., a_n\}$
- Естественное обобщение: $||r|| = ||Ax b|| \rightarrow \min$
- Введем квадратичный функционал:

$$F(x) = ||Ax - b||_{2}^{2} = (Ax - b, Ax - b) =$$

$$\sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} - b_{i} \right)^{2}$$

$$\nabla F(x) = 2(A^{*}Ax - A^{*}b) = 0 \iff A^{*}Ax = A^{*}b$$

- Ax = b, $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, m > n, rank(A) = n
- В общем случае система не имеет решения: $Ax = b \iff b \in Lin\{a_1, ..., a_n\}$
- Естественное обобщение: $||r|| = ||Ax b|| \rightarrow \min$
- Введем квадратичный функционал:

$$F(x) = ||Ax - b||_{2}^{2} = (Ax - b, Ax - b) =$$

$$\sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_{j} - b_{i} \right)^{2}$$

$$\nabla F(x) = 2(A^{*}Ax - A^{*}b) = 0 \iff A^{*}Ax = A^{*}b$$

• Систему $(A^*A)x = A^*b$ называют системой нормальных уравнений

• Ах - вектор из линейной оболочки столбцов А

- Ах вектор из линейной оболочки столбцов А
- Хотим найти в $Lin\{a_1,...,a_n\}$ вектор, ближайший к вектору b из $\mathbb{R}^m, m > n$.

- Ах вектор из линейной оболочки столбцов А
- Хотим найти в $Lin\{a_1,...,a_n\}$ вектор, ближайший к вектору b из $\mathbb{R}^m, m > n$.
- Решение получается *ортогональной проекцией b* на $Lin\{a_1,...,a_n\}$

- Ах вектор из линейной оболочки столбцов А
- Хотим найти в $Lin\{a_1,...,a_n\}$ вектор, ближайший к вектору b из $\mathbb{R}^m, m > n$.
- Решение получается *ортогональной проекцией b* на $Lin\{a_1,...,a_n\}$

$$b = Ax + v, v \perp Lin\{a_1, \ldots, a_n\} \Rightarrow A^*b = A^*Ax + 0$$

• Метод Холецкого:

- Метод Холецкого:
 - lacktriangledown Вычисляем матрицу A^*A и вектор A^*b

- Метод Холецкого:
 - lacktriangle Вычисляем матрицу A^*A и вектор A^*b
 - **2** Вычисляем разложение Холецкого $A^*A = CC^*$

- Метод Холецкого:
 - lacktriangle Вычисляем матрицу A^*A и вектор A^*b
 - **2** Вычисляем разложение Холецкого $A^*A = CC^*$
 - **3** Решаем 2 системы $Cy = A^*b$, $C^*x = y$

- Метод Холецкого:
 - lacktriangle Вычисляем матрицу A^*A и вектор A^*b
 - **2** Вычисляем разложение Холецкого $A^*A = CC^*$
 - **3** Решаем 2 системы $Cy = A^*b$, $C^*x = y$
- *QR*-разложение

$$x = (A^*A)^{-1}A^*b = (R^*Q^*QR)^{-1}R^*Q^*b = (R^*R)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}(R^*)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}Q^*b$$

- Метод Холецкого:
 - lacktriangle Вычисляем матрицу A^*A и вектор A^*b
 - **2** Вычисляем разложение Холецкого $A^*A = CC^*$
 - **3** Решаем 2 системы $Cy = A^*b$, $C^*x = y$
- *QR*-разложение

$$x = (A^*A)^{-1}A^*b = (R^*Q^*QR)^{-1}R^*Q^*b = (R^*R)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}(R^*)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}Q^*b$$

lacktriangle Вычисляем A = QR

- Метод Холецкого:
 - lacktriangle Вычисляем матрицу A^*A и вектор A^*b
 - **2** Вычисляем разложение Холецкого $A^*A = CC^*$
 - **3** Решаем 2 системы $Cy = A^*b$, $C^*x = y$
- *QR*-разложение

$$x = (A^*A)^{-1}A^*b = (R^*Q^*QR)^{-1}R^*Q^*b = (R^*R)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}(R^*)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}Q^*b$$

- lacktriangle Вычисляем A = QR
- Вычисляем Q*b

- Метод Холецкого:
 - lacktriangle Вычисляем матрицу A^*A и вектор A^*b
 - **2** Вычисляем разложение Холецкого $A^*A = CC^*$
 - **3** Решаем 2 системы $Cy = A^*b$, $C^*x = y$
- *QR*-разложение

$$x = (A^*A)^{-1}A^*b = (R^*Q^*QR)^{-1}R^*Q^*b = (R^*R)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}(R^*)^{-1}R^*Q^*b = R^{-1}Q^*b$$

- lacktriangle Вычисляем A = QR
- Вычисляем Q*b
- \bigcirc Решаем систему $Rx = Q^*b$

ullet Даны значения функции y_1,\ldots,y_m в точках x_1,\ldots,x_m

- ullet Даны значения функции y_1,\ldots,y_m в точках x_1,\ldots,x_m
- Хотим приблизить функцию многочленом степени n-1, $n \le m$

- ullet Даны значения функции y_1,\ldots,y_m в точках x_1,\ldots,x_m
- Хотим приблизить функцию многочленом степени n-1, n < m

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1^1 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2^1 & \cdots & x_2^{n-1} \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & x_m^1 & \cdots & x_m^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

- ullet Даны значения функции y_1,\ldots,y_m в точках x_1,\ldots,x_m
- Хотим приблизить функцию многочленом степени n-1, n < m

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1^1 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2^1 & \cdots & x_2^{n-1} \\ \vdots & & \vdots \\ 1 & x_m^1 & \cdots & x_m^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

• При n = m существует единственное решение