

§ 1. Численные методы решения интегральных уравнений.

Задача решения интегральных уравнений возникает как вспомогательная при решении краевых задач для дифференциальных уравнений с частными производными и как самостоятельная при решении так называемых обратных задач, при обработке результатов наблюдений и т.п.

Рассмотрим следующее интегральное уравнение Фредгольма второго рода:

$$y(x) - \lambda \int_a^b K(x, s)y(s)ds = f(x), \quad (1)$$

где $y(x)$ - искомая, $K(x, s)$, $f(x)$ - заданные функции, λ - заданное число. Предполагается, что ядро $K(x, s)$ и правая часть $f(x)$ - достаточно гладкие функции, функция $K(x, s)$ симметрична ($K(x, s) = K(s, x)$ для всех x, s).

Для решения интегрального уравнения (1) заменим интеграл, входящий в это уравнение, квадратурной формулой:

$$\int_a^b K(x, s)y(s)ds \approx \sum_{j=1}^m c_j K(x, x_j^{(m)})y(x_j^{(m)}). \quad (2)$$

Подставляя (2) в (1) и полагая затем $x = x_i^{(m)}$, $i = 1, 2, \dots, m$, получим систему линейных алгебраических уравнений для приближенного решения уравнения (1) :

$$y(x_i^{(m)}) - \lambda \sum_{j=1}^m c_j K(x_i^{(m)}, x_j^{(m)})y(x_j^{(m)}) = f(x_i^{(m)}), i = 1, 2, \dots, m \quad (3)$$

относительно неизвестных $y_i = y(x_i^{(m)})$, $i = 1, 2, \dots, m$. Решив эту систему, путем интерполяции можно найти решение интегрального уравнения (1) на всем отрезке $[a, b]$.

Отметим, что несмотря на то, что ядро $K(x, s)$ симметрично, матрица $c_j K(x_i^{(m)}, x_j^{(m)})$ системы (3) не обязательно будет симметричной. Чтобы получить систему с симметричной матрицей (в случае, когда $c_j > 0$), умножим i -е уравнение в (3) на $\sqrt{c_i}$ и положим $\sqrt{c_i} = z_i$. В результате получим систему уравнений

$$z_i - \lambda \sum_{j=1}^m \sqrt{c_i} \sqrt{c_j} K(x_i^{(m)}, x_j^{(m)})z_j = f(x_i^{(m)}), i = 1, 2, \dots, m \quad (4)$$

Для решения систем (3), (4) могут использоваться стандартные методы решения систем линейных алгебраических уравнений.

§ 2. Численные методы решения систем линейных алгебраических уравнений.

Методы решения систем линейных алгебраических уравнений разделяются на точные (прямые), итерационные и вероятностные. Классы задач, для решения которых применяются методы этих групп, можно условно назвать соответственно классами задач с малым, средним и большим числом неизвестных. Изменение объема и структуры памяти ЭВМ, увеличение их быстродействия

и развитие численных методов приводят к смещению границ применения методов в сторону систем более высоких порядков. К тому же ситуация сильно зависит и от свойств матрицы решаемой системы уравнений. В настоящее время точные методы обычно применяются для решения систем до порядка 10^4 , итерационные - до порядка 10^7 .

В прямых методах решение системы находится за конечное число арифметических операций. Отметим, что вследствие погрешностей округления (неизбежных при решении систем на ЭВМ) прямые методы не приводят к точному решению. Более того, главным недостатком прямых методов является достаточно быстрое накопление ошибок округления, что приводит к сильному искажению результата.

Итерационные методы состоят в том, что решение системы находится как предел бесконечной последовательности приближений. Итерационные методы не приводят к накоплению ошибок округления, однако при их использовании главной проблемой является выбор критерия останова процесса вычислений.

§ 3. Метод Гаусса.

Рассматривается система линейных уравнений вида

$$Ax = b \quad (5)$$

с невырожденной матрицей A (т.е. $\det A \neq 0$) порядка n , или в покоординатном виде:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (6)$$

Умножим первое уравнение в (6) на $-a_{k1}/a_{11}$ и сложим с k -м уравнением, $k = 2, 3, \dots, n$. В результате получим систему

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + \dots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + \dots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ \dots \\ a_{n2}^{(2)}x_2 + \dots + a_{nn}^{(2)}x_n = b_n^{(2)} \end{cases} \quad (7)$$

где

$$a_{kj}^{(2)} = a_{kj}^{(1)} - a_{1j}^{(1)} \frac{a_{k1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad b_k^{(2)} = b_k^{(1)} - b_1^{(1)} \frac{a_{k1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}, \quad k, j = 2, 3, \dots, n,$$

$$a_{kj}^{(1)} = a_{kj}, \quad b_k^{(1)} = b_k, \quad k, j = 1, 2, \dots, n,$$

Затем второе уравнение в (7) умножаем на $-a_{k2}^{(2)}/a_{22}^{(2)}$ и сложим с k -м уравнением, $k = 3, 4, \dots, n$. Продолжая указанный процесс (называемый прямым ходом метода Гаусса), в результате получим систему с верхней треугольной матрицей:

$$\begin{cases} a_{11}^{(1)}x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 + \dots + a_{1n}^{(1)}x_n = b_1^{(1)} \\ a_{22}^{(2)}x_2 + a_{23}^{(2)}x_3 + \dots + a_{2n}^{(2)}x_n = b_2^{(2)} \\ a_{33}^{(3)}x_3 + \dots + a_{3n}^{(3)}x_n = b_3^{(3)} \\ \dots \\ a_{nn}^{(n)}x_n = b_n^{(n)} \end{cases} \quad (8)$$

Решение же системы (8) (обратный ход метода Гаусса) не представляет особого труда.

Общие формулы прямого хода метода Гаусса имеют вид:

$$a_{kj}^{(i+1)} = a_{kj}^{(i)} - a_{ij}^{(i)} \frac{a_{ki}^{(1)}}{a_{ii}^{(i)}}, \quad b_k^{(i+1)} = b_k^{(i)} - b_i^{(i)} \frac{a_{i1}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$k, j = i+1, i+2, \dots, n,$$

$$a_{kj}^{(1)} = a_{kj}, \quad b_k^{(1)} = b_k, \quad k, j = 1, 2, \dots, n, \quad (9)$$

Чтобы при вычислениях по формулам (9) избежать деления на нуль и уменьшить вычислительную погрешность, применяют метод Гаусса с выбором главного элемента. Опишем эту модификацию метода Гаусса.

После $i-1$ -го шага матрица системы преобразуется к виду:

$$A^{(i)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1i}^{(1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ & a_{22}^{(2)} & \dots & a_{2i}^{(2)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ & & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ & & & a_{ii}^{(i)} & a_{ii+1}^{(i)} & \dots & a_{in}^{(i)} \\ & & & a_{i+1i}^{(i)} & a_{i+1i+1}^{(i)} & \dots & a_{i+1n}^{(i)} \\ & & & & \dots & \dots & \dots \\ & & & a_{ni}^{(i)} & a_{ni+1}^{(i)} & \dots & a_{nn}^{(i)} \end{pmatrix}$$

Вышеприведенные преобразования не меняют определитель матрицы, поэтому в i -й строке матрицы найдется ненулевой элемент. Аналогично, в i -м столбце матрицы $A^{(i)}$ существует ненулевой элемент (в противном случае, пропустив i -й шаг указанного процесса, мы получили бы треугольную матрицу с нулевым элементом на главной диагонали, т.е. матрица была бы вырожденной).

Найдем l такое, что

$$|a_{il}^{(i)}| = \max_{j=i+1, i+2, \dots, n} |a_{ij}^{(i)}|,$$

и переобозначим $x_i = x_l$ и $x_l = x_i$; далее производим исключение неизвестной x_i . Такое переобозначение означает перестановку столбцов матрицы, и приводит лишь к изменению знака определителя матрицы. Указанная модификация называется методом Гаусса с выбором главного элемента по строкам.

Аналогичным образом можно получить метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцам.

Заметим, что при численной реализации метода Гаусса с выбором главного элемента нет необходимости осуществлять перестановку строк или столбцов матрицы. Можно завести вектор перестановок, первоначальные значения компонентов которого есть $p = (1, 2, \dots, n)$. После выбора главного элемента на i -м шаге необходимо переставить местами i -й и l -й элементы вектора p . В расчетных формулах вместо столбцовых индексов k матрицы (в случае метода Гаусса с выбором главного элемента по столбцам) или строчных индексов k матрицы и правой части (в случае метода Гаусса с выбором главного элемента по строкам) нужно использовать значения $p(k)$.

§ 4. Схема Жордана.

Если на i -м шаге метода Гаусса проводить исключение неизвестного x_i не только из уравнений с номерами $i + 1, i + 2, \dots, n$, но из всех уравнений, кроме i -го, то получим так называемую схему Жордана. В результате прямого хода метода Жордана мы получим диагональную матрицу. Расчетные формулы метода Жордана получаются из формул (9) соответствующей корректировкой пределов изменения индекса k :

$$a_{kj}^{(i+1)} = a_{kj}^{(i)} - a_{ij}^{(i)} \frac{a_{ki}^{(1)}}{a_{ii}^{(i)}}, \quad b_k^{(i+1)} = b_k^{(i)} - b_i^{(i)} \frac{a_{i1}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1,$$

$$k, j = 1, 2, \dots, i-1, i+1, \dots, n, \quad j = i+1, i+2, \dots, n,$$

$$a_{kj}^{(1)} = a_{kj}, \quad b_k^{(1)} = b_k, \quad k, j = 1, 2, \dots, n, \quad (10)$$

Так же, как и в методе Гаусса, используют метод Жордана с выбором главного элемента.

§ 5. Компактная схема метода Гаусса (LU и LDU -разложения).

Заметим, что преобразование матрицы системы на i -м шаге эквивалентно умножению слева имеющейся матрицы на нижнюю треугольную матрицу вида

$$C^{(i)} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & 1 & & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & 1 & & \\ & & & \alpha_{i+1} & 1 & \\ & & & \dots & & \ddots \\ & & & \alpha_n & & 1 \end{pmatrix}, \quad \alpha_k = -\frac{a_{ki}^{(1)}}{a_{ii}^{(i)}}, \quad k = i+1, i+2, \dots, n.$$

Таким образом, прямой ход метода Гаусса, в результате которого матрица A преобразуется в верхнюю треугольную матрицу U , может быть записан в виде:

$$C^{(n-1)} C^{(n-2)} \dots C^{(2)} C^{(1)} A = C A = U.$$

Матрица $C = C^{(n-1)} C^{(n-2)} \dots C^{(2)} C^{(1)}$ как произведение нижних треугольных матриц также является нижней треугольной. Обратная к ней матрица $L = C^{-1}$ также является нижней треугольной матрицей. Следовательно, мы имеем разложение матрицы A на произведение

$$A = LU.$$

Получим формулы для элементов матриц L и U непосредственно через элементы матрицы A . Имеем:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kj} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik} u_{kj},$$

поскольку $l_{ik} = 0$ при $i < k$, $u_{kj} = 0$ при $j < k$.

1. Пусть $l_{ii} = 1, i = 1, 2, \dots, n$.

При $j \geq i$ имеем:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ii} u_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} + u_{ij},$$

откуда

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}, \quad j = i, i+1, \dots, n. \quad (11)$$

При $i > j$ имеем:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} + l_{ij} u_{jj},$$

откуда

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}}{u_{jj}}, \quad i = j+1, j+2, \dots, n. \quad (12)$$

II. Если же предположить, что $u_{ii} = 1, i = 1, 2, \dots, n$, то получим следующие формулы для вычисления элементов матриц L и U :

$$u_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj}}{l_{ii}}, \quad j = i+1, i+2, \dots, n, \quad (13)$$

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, \quad i = j, j+1, \dots, n. \quad (14)$$

III. Можно также получить разложение матрицы A на произведение

$$A = L D U,$$

где D - диагональная матрица, L и U - соответственно нижняя и верхняя треугольные матрицы с единичными главными диагоналями ($l_{ii} = u_{ii} = 1, i = 1, 2, \dots, n$). Имеем

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} d_{kk} u_{kj} = \sum_{k=1}^{\min\{i,j\}} l_{ik} d_{kk} u_{kj},$$

откуда получаем при $j > i$:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_{kk} u_{kj} + l_{ii} d_{ii} u_{ij} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_{kk} u_{kj} + d_{ii} u_{ij},$$

$$u_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_{kk} u_{kj}}{d_{ii}}, \quad j = i+1, i+2, \dots, n, \quad (15)$$

при $i > j$:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_{kk} u_{kj} + l_{ij} d_{jj} u_{jj} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_{kk} u_{kj} + l_{ij} d_{jj},$$

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_{kk} u_{kj}}{d_{jj}}, \quad i = j + 1, j + 2, \dots, n, \quad (16)$$

а при $i = j$:

$$a_{ii} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_{kk} u_{ki} + l_{ii} d_{ii} u_{ii} = \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_{kk} u_{ki} + d_{ii},$$

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} d_{kk} u_{ki}, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (17)$$

После вычисления разложения матрицы A на произведение LU или LDU , нахождение решения исходной системы (5) сводится к последовательному решению систем

$$Ly = b, \quad Ux = y,$$

или

$$Ly = b, \quad Dz = y, \quad Ux = z.$$

Для уменьшения вычислительной погрешности при разложении матрицы применяют выбор главного элемента (по строкам в случае метода I, по столбцам - в случае метода II, по строкам или столбцам - в случае метода III).

§ 6. Метод внешних произведений вычисления LU и LDU - разложений.

Представим матрицу A в следующем блочном виде:

$$A = \begin{pmatrix} d & v^T \\ w & \bar{H} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где

$$d = a_{11}, \quad w = \begin{pmatrix} a_{21} \\ a_{31} \\ \vdots \\ a_{n1} \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{13} \\ \vdots \\ a_{1n} \end{pmatrix}, \quad \bar{H} = \begin{pmatrix} a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n2} & a_{n3} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}.$$

Пусть

$$L = \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ x & L_H \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} d & v^T \\ \theta & U_H \end{pmatrix},$$

где L_H - нижняя треугольная матрица порядка $n - 1$ с единичной главной диагональю, U_H - верхняя треугольная матрица порядка $n - 1$, θ - нулевой вектор порядка $n - 1$. Имеем:

$$LU = \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ x & L_H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d & v^T \\ \theta & U_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d & v^T \\ dx & xv^T + L_H U_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d & v^T \\ w & \bar{H} \end{pmatrix} = A,$$

если $x = w/d$, $L_H U_H = \bar{H} - xv^T = \bar{H} - wv^T/d$, где wv^T - матрица (внешнее произведение векторов w и v^T) порядка $n - 1$ вида

$$wv^T = \begin{pmatrix} w_2 v_2 & w_2 v_3 & \cdots & w_2 v_n \\ w_3 v_2 & w_3 v_3 & \cdots & w_3 v_n \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ w_n v_2 & w_n v_3 & \cdots & w_n v_n \end{pmatrix}.$$

Таким образом, мы построили первый столбец и первую строку матриц L и U соответственно. Остальные столбцы и строки матриц L и U можно построить, разложив матрицу $\bar{H} - wv^T/d$ порядка $n - 1$. Разложение этой матрицы проводится аналогичным образом.

Итак, мы получили следующий метод разложения матрицы на произведение нижней треугольной матрицы с единичной главной диагональю и верхней треугольной матрицы.

Пусть $A = A^{(n)}$. Для $k = n, n - 1, \dots, 1$ представляем матрицу $A^{(k)}$ в следующем блочном виде:

$$\begin{pmatrix} d^{(k)} & (v^{(k)})^T \\ w^{(k)} & \bar{A}^{(k)} \end{pmatrix}, \quad (19)$$

Вычисляем $(n - k + 1)$ -й столбец матрицы L и $(n - k + 1)$ -ю строку матрицы U :

$$l_{n-k+1, n-k+1} = 1,$$

$$l_{jn-k+1} = \frac{w_j^{(k)}}{d^{(k)}} = \frac{a_{jn-k+1}^{(k)}}{a_{n-k+1, n-k+1}^{(k)}}, \quad j = n - k + 2, n - k + 3, \dots, n, \quad (20)$$

$$u_{n-k+1, j} = w_j^{(k)} = a_{n-k+1, j}^{(k)}, \quad j = n - k + 1, n - k + 2, \dots, n,$$

Затем вычисляем элементы матрицы $A^{(k-1)} = \bar{A}^{(k)} - w^{(k-1)}(v^{(k-1)})^T/d^{(k)}$ по формулам:

$$a_{ij}^{(k-1)} = a_{ij}^{(k-1)} - \frac{a_{jn-k+1}^{(k)} a_{n-k+1, j}^{(k)}}{a_{n-k+1, n-k+1}^{(k)}}, \quad j = n - k + 2, n - k + 3, \dots, n, \quad (21)$$

Аналогичным образом получают формулы метода внешних произведений разложения матрицы на произведение нижней треугольной матрицы и верхней треугольной матрицы с единичной главной диагональю.

Пусть $A = A^{(n)}$. Для $k = n, n - 1, \dots, 1$ вычисляем $(n - k + 1)$ -й столбец матрицы L и $(n - k + 1)$ -ю строку матрицы U :

$$u_{n-k+1, n-k+1} = 1,$$

$$u_{n-k+1, j} = \frac{v_j^{(k)}}{d^{(k)}} = \frac{a_{n-k+1, j}^{(k)}}{a_{n-k+1, n-k+1}^{(k)}}, \quad j = n - k + 2, n - k + 3, \dots, n, \quad (22)$$

$$l_{jn-k+1} = w_j^{(k)} = a_{jn-k+1}^{(k)}, \quad j = n - k + 1, n - k + 2, \dots, n,$$

Затем вычисляем элементы матрицы $A^{(k-1)}$ по формулам (21).

Получим теперь формулы метода внешних произведений разложения матрицы на произведение нижней и верхней треугольных матриц и верхней с единичными главными диагоналями и диагональной матрицы:

$$A = LDU.$$

Представим матрицу A в блочном виде (18).

Пусть

$$L = \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ w/d & L_H \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} d & \theta^T \\ \theta & D_H \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} d & v^T/d \\ \theta & U_H \end{pmatrix},$$

где L_H - нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю порядка $n - 1$, U_H - верхняя треугольная матрица с единичной главной диагональю порядка $n - 1$, D_H - диагональная матрица порядка $n - 1$, θ - нулевой вектор порядка $n - 1$.

Имеем:

$$\begin{aligned} A = LDU &= \begin{pmatrix} 1 & \theta^T \\ w/d & L_H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d & \theta^T \\ \theta & D_H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d & v^T/d \\ \theta & U_H \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} d & \theta^T \\ w & L_H D_H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d & v^T/d \\ \theta & U_H \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} d & v^T \\ w & wv^T/d + L_H D_H U_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d & v^T \\ w & \bar{H} \end{pmatrix} = A, \end{aligned}$$

если $L_H D_H U_H = \bar{H} - wv^T/d$. Используя это разложение, получим следующий метод LDU - разложения матрицы A .

Пусть $A = A^{(n)}$. Для $k = n, n-1, \dots, 1$ представляем матрицу $A^{(k)}$ в блочном виде (19).

Вычисляем $(n - k + 1)$ -й столбец матрицы L , $(n - k + 1)$ -ю строку матрицы U и соответствующий диагональный элемент матрицы D :

$$\begin{aligned} l_{n-k+1, n-k+1} &= u_{n-k+1, n-k+1} = 1, \quad d_{n-k+1, n-k+1} = d^{(k)} = a_{n-k+1, n-k+1}, \\ l_{j, n-k+1} &= \frac{w_j^{(k)}}{d^{(k)}} = \frac{a_{j, n-k+1}^{(k)}}{a_{n-k+1, n-k+1}^{(k)}}, \quad j = n - k + 2, n - k + 3, \dots, n, \\ u_{n-k+1, j} &= \frac{v_j^{(k)}}{d^{(k)}} = \frac{a_{n-k+1, j}^{(k)}}{a_{n-k+1, n-k+1}^{(k)}}, \quad j = n - k + 2, n - k + 3, \dots, n, \end{aligned} \quad (23)$$

Затем вычисляем элементы матрицы $A^{(k-1)} = \bar{A}^{(k)} - w^{(k-1)}(v^{(k-1)})^T/d^{(k)}$ по формулам (21).

В заключение отметим, что во всех трех случаях можно производить вычисления с выбором главного элемента (по столбцу - в первом случае, по строке - во втором случае, по столбцу или по строке - в третьем случае).

§ 7. Метод окаймления вычисления LU и LDU - разложений.

Представим матрицу A в следующем блочном виде:

$$A = \begin{pmatrix} M & v \\ w^T & s \end{pmatrix},$$

где

$$\begin{aligned} s &= a_{nn}, \quad w = \begin{pmatrix} a_{n1} \\ a_{n2} \\ \vdots \\ a_{nn-1} \end{pmatrix}, \quad v = \begin{pmatrix} a_{1n} \\ a_{2n} \\ \vdots \\ a_{n-1n} \end{pmatrix}, \\ M &= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n-11} & a_{n-12} & \cdots & a_{n-1n-1} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Пусть $M = L_M U_M$, (L_M - нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю порядка $n - 1$, U_M - верхняя треугольная матрица порядка $n - 1$),

$$L = \begin{pmatrix} L_M & \theta \\ x^T & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} U_M & y \\ \theta^T & d \end{pmatrix},$$

где θ - нулевой вектор порядка $n - 1$. Имеем:

$$LU = \begin{pmatrix} L_M & \theta \\ x^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_M & y \\ \theta^T & d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_M U_M & L_M y \\ x^T U_M & x^T y + d \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M & v \\ w^T & s \end{pmatrix} = A,$$

если

$$L_M y = v, \quad U_M^T x = w, \quad (24)$$

$$d = s - x^T y. \quad (25)$$

Таким образом, если известно разложение матрицы M , то решив системы (24) относительно x и y , и вычислив затем число d по формуле (25), мы получим последнюю строку и столбец матриц L и U соответственно.

Итак, мы получили следующий метод разложения матрицы на произведение нижней треугольной матрицы с единичной главной диагональю и верхней треугольной матрицы.

Полагаем

$$L_1 = (1), \quad U_1 = (a_{11}).$$

Пусть для $i = 2, 3, \dots, n$ уже построены матрицы

$$L_{i-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{i-11} & l_{i-12} & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad U_{i-1} = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{i-1i-1} \end{pmatrix}.$$

Решаем затем системы

$$L_{i-1} y = v^i, \quad U_{i-1}^T x = w^i, \quad (26)$$

где

$$w^i = \begin{pmatrix} a_{i1} \\ a_{i2} \\ \vdots \\ a_{ii-1} \end{pmatrix}, \quad v^i = \begin{pmatrix} a_{1i} \\ a_{2i} \\ \vdots \\ a_{i-1i} \end{pmatrix}, \quad (27)$$

Затем вычисляем элементы i -го столбца матрицы L и i -й строки матрицы U :

$$l_{ij} = x_j, \quad j = 1, 2, \dots, i - 1, \quad l_{ii} = 1; \\ u_{ji} = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, i - 1, \quad u_{ii} = a_{ii} - \sum_{j=1}^{i-1} x_j y_j. \quad (28)$$

Аналогичным образом строится разложение матрицы A на произведение нижней треугольной матрицы с единичной главной диагональю и верхней треугольной матрицы с единичной главной диагональю, а также разложение разложения матрицы на произведение нижней и верхней треугольных матриц и верхней с единичными главными диагоналями и диагональной матрицы:

$$A = L D U.$$

В первом случае полагаем

$$L_1 = (a_{11}), \quad U_1 = (1).$$

Пусть для $i = 2, 3, \dots, n$ уже построены матрицы

$$L_{i-1} = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{i-11} & l_{i-12} & \cdots & l_{i-1i-1} \end{pmatrix}, \quad U_{i-1} = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Решаем затем системы (26), где w^i и v^i определяются согласно (27). Затем вычисляем элементы i -го столбца и i -й строки матриц L и U :

$$l_{ij} = x_j, \quad j = 1, 2, \dots, i-1, \quad l_{ii} = a_{ii} - \sum_{j=1}^{i-1} x_j y_j;$$

$$u_{ji} = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, i-1, \quad u_{ii} = a_{ii}. \quad (29)$$

Во втором случае полагаем

$$L_1 = (1), \quad D_1 = (a_{11}), \quad U_1 = (1).$$

Пусть для $i = 2, 3, \dots, n$ уже построены матрицы

$$L_{i-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ l_{i-11} & l_{i-12} & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad D_{i-1} = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_{22} & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_{i-1i-1} \end{pmatrix},$$

$$U_{i-1} = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \cdots & u_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix}.$$

Решаем затем системы

$$L_{i-1} z = v^i, \quad U_{i-1}^T D_{i-1} x = w^i, \quad D_{i-1} y = z,$$

где w^i и v^i определяются согласно (27).

Затем полагаем

$$l_{ij} = x_j, \quad j = 1, 2, \dots, i-1, \quad l_{ii} = 1; \quad u_{ji} = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, i-1, \quad u_{ii} = 1;$$

$$d_{ii} = a_{ii} - \sum_{j=1}^{i-1} x_j z_j. \quad (30)$$

Во всех трех случаях можно производить вычисления с выбором главного элемента (по столбцу - в первом случае, по строке - во втором случае, по столбцу или по строке - в третьем случае).

§ 8. Метод ортогонализации.

Запишем систему уравнений (6) в виде

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n + a_{1n+1} = 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n + a_{2n+1} = 0 \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n + a_{nn+1} = 0, \end{cases} \quad (31)$$

где $a_{i1n+1} = -b_i$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Введем теперь в рассмотрение вектор $y = (x_1, x_2, \dots, x_n, 1)^T$ и вектора $a^{(i)} = (a_{i1}, a_{i2}, \dots, a_{in+1})^T$, $i = 1, 2, \dots, n$. Тогда равенства (31) означают, что $a^{(i)T}y = 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, и, следовательно, решение системы (31) эквивалентно построению вектора y порядка $n+1$, последняя компонента которого равна 1, ортогонального векторам $a^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Положим теперь $a^{(n+1)} = (0, 0, \dots, 0, 1)^T$. Вектора $a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(n+1)}$ линейно независимы (в противном случае определитель, строками которого являются эти векторы, совпадает с определителем матрицы A и равен нулю, что противоречит предположению о невырожденности решаемой системы уравнений). Применяв к этой системе векторов процесс ортонормализации Грамма-Шмидта, получим систему ортонормированных векторов $v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(n+1)}$. Последняя компонента вектора $v^{(n+1)}$ отлична от нуля. Действительно, он ортогонален векторам $v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(n)}$, а следовательно, и векторам $a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(n)}$, которые по построению являются линейными комбинациями векторов $v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(n)}$, т.е.

$$(a^{(i)})^T v^{(n+1)} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (32)$$

Пусть $v^{(n+1)} = (z_1, z_2, \dots, z^{(n+1)})^T$, тогда равенства (32) можно переписать в виде:

$$\begin{cases} a_{11}z_1 + a_{12}z_2 + \dots + a_{1n}z_n + a_{1n+1}z_{n+1} = 0 \\ a_{21}z_1 + a_{22}z_2 + \dots + a_{2n}z_n + a_{2n+1}z_{n+1} = 0 \\ \dots \\ a_{n1}z_1 + a_{n2}z_2 + \dots + a_{nn}z_n + a_{nn+1}z_{n+1} = 0. \end{cases} \quad (33)$$

Если предположить, что $z_{n+1} = 0$, то (33) дает однородную систему

$$\begin{cases} a_{11}z_1 + a_{12}z_2 + \dots + a_{1n}z_n = 0 \\ a_{21}z_1 + a_{22}z_2 + \dots + a_{2n}z_n = 0 \\ \dots \\ a_{n1}z_1 + a_{n2}z_2 + \dots + a_{nn}z_n = 0 \end{cases}$$

с невырожденной матрицей A , а следовательно, $z_i = 0$, $i = 1, 2, \dots, n$, т.е. $v^{(n+1)} = 0$, что противоречит линейной независимости векторов $v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(n+1)}$.

Очевидно, что наряду с $v^{(n+1)}$ вектор

$$\frac{1}{z_{n+1}} v^{(n+1)} = \left(\frac{z_1}{z_{n+1}}, \frac{z_2}{z_{n+1}}, \dots, \frac{z_{n+1}}{z_{n+1}}, 1 \right)^T$$

также ортогонален векторам $a^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, n$.

Таким образом, вектор $x = (z_1/z_{n+1}, z_2/z_{n+1}, \dots, z_{n+1}/z_{n+1}, 1)^T$ является решением исходной системы (31).

В заключение опишем процесс ортонормализации Грамма-Шмидта, с помощью которого по заданной линейно независимой системе векторов $a^{(1)}, a^{(2)}, \dots, a^{(n+1)}$ можно построить систему ортонормированных векторов $v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(n+1)}$.

Для произвольного вектора x обозначим $\|x\| = \sqrt{x^T x}$. Положим

$$u^{(1)} = a^{(1)}, v^{(1)} = \frac{u^{(1)}}{\|u^{(1)}\|}.$$

Далее для $i = 1, 2, \dots, n$ положим

$$u^{(i+1)} = a^{(i+1)} - \sum_{j=1}^i c_{ij} v^{(j)}$$

и определим c_{ij} , $j = 1, 2, \dots, i$, из условия ортогональности $u^{(i+1)}$ к $v^{(1)}, v^{(2)}, \dots, v^{(i)}$:

$$\left(u^{(i+1)}\right)^T v^{(j)} = 0, j = 1, 2, \dots, i.$$

Из этих условий, очевидно, имеем

$$c_{ij} = \left(a^{(i+1)}\right)^T v^{(j)}, j = 1, 2, \dots, i.$$

После этого вычисляем

$$v^{(i+1)} = \frac{u^{(i+1)}}{\|u^{(i+1)}\|}.$$

§ 9. Метод отражения (QR и QL - разложения).

Пусть $w = (w_1, w_2, \dots, w_n)^T$ - произвольный единичный вектор (т.е. $\|w\| = 1$), E - единичная матрица порядка $n - 1$,

$$R = E - 2ww^T. \quad (34)$$

Матрица R (называемая матрицей отражения) является симметричной (т.е. $R = R^T$) и ортогональной (т.е. $R^{-1} = R^T$). Действительно,

$$\begin{aligned} R^T &= (E - 2ww^T)^T = E - 2(w^T)^T w = E - 2ww^T = R, \\ RR^T &= (E - 2ww^T)(E - 2ww^T)^T = E - 2ww^T - 2ww^T + 4ww^T ww^T = \\ &= E - 4ww^T + 4w(w^T w)w^T = E - 4ww^T + 4ww^T = E. \end{aligned}$$

Пусть s - заданный вектор, e - заданный единичный вектор, $\|s\| = |\alpha|$,

$$w = \frac{1}{\rho}(s - \alpha e), \rho = \|s - \alpha e\|, R = E - 2ww^T.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \rho &= \sqrt{(s - \alpha e)^T (s - \alpha e)} = \sqrt{(s^T s - 2\alpha s^T e + \alpha^2)} = \\ &= \sqrt{(s^T s - 2\alpha s^T e + s^T s)} = \sqrt{(2s^T (s - \alpha e))}, \end{aligned}$$

следовательно,

$$Rs = (E - 2ww^T)s = s - 2w(w^T s) = s - \frac{1}{\rho}(s - \alpha e) \left(2 \frac{1}{\rho}(s - \alpha e)^T s\right) =$$

$$= s - \frac{1}{\rho^2} (s - \alpha e) (2s^T (s - \alpha e)) = s - \frac{1}{\rho^2} (s - \alpha e) \rho^2 = s - (s - \alpha e) = \alpha e,$$

т.е. оператор R переводит заданный вектор s в вектор, коллинеарный вектору e .

Если $e = (1, 0, \dots, 0)^T$, $\alpha = -\|s\| s_1 / |s_1|$, то оператор R , построенный указанным выше способом переводит вектор s в вектор, у которого лишь первая компонента ненулевая. При этом компоненты вектора w имеют следующий вид:

$$w_1 = \frac{s_1 - \alpha}{\rho}, \quad w_i = \frac{s_i}{\rho}, \quad i = 2, 3, \dots, n,$$

$$\rho = \sqrt{2(\|s\|^2 - \alpha s_1)} = \sqrt{2(\|s\|^2 - \|s\| |s_1|)}. \quad (35)$$

Используя матрицы отражения, любую матрицу A можно разложить на произведение

$$A = QU$$

или

$$A = QL,$$

где Q - ортогональная, U - верхняя треугольная, L - нижняя треугольная матрицы.

Рассмотрим сначала метод разложения матрицы A на произведение $A = QU$.

Пусть $s = a^{(1)} = (a_{11}, a_{21}, \dots, a_{n1})^T$. Согласно формулам (34), (35) построим матрицу отражения R_1 такую, что

$$R_1 a^{(1)} = \alpha e^{(1)}, \quad e^{(1)} = (1, 0, \dots, 0)^T.$$

Обозначим $A_1 = R_1 A$. Первый столбец матрицы A_1 имеет вид $(a_{11}^{(1)}, 0, \dots, 0)^T$.

Затем строим матрицу отражения \bar{R}_2 порядка $n-1$, переводящую вектор $a^{(2)} = (a_{22}^{(2)}, a_{32}^{(2)}, \dots, a_{n2}^{(2)})^T$ в вектор, коллинеарный $(n-1)$ -мерному вектору $e^{(2)} = (0, 1, 0, \dots, 0)^T$, полагаем

$$R_2 = \begin{pmatrix} 1 & \theta_{n-1}^T \\ \theta_{n-1} & \bar{R}_2 \end{pmatrix}$$

и обозначаем $A_2 = R_2 A_1$. Имеем

$$A_2 = \begin{pmatrix} 1 & \theta_{n-1}^T \\ \theta_{n-1} & \bar{R}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & (v^{(1)})^T \\ \theta_{n-1} & \bar{A}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & (v^{(1)})^T \\ \theta_{n-1} & \bar{R}_2 \bar{A}_2 \end{pmatrix}.$$

Продолжая указанный выше процесс, получим верхнюю треугольную матрицу

$$U = R_{n-1} R_{n-2} \cdots R_2 R_1 A = RA,$$

т.е.

$$A = R^{-1} U = R^T U = QU.$$

Матрица R как произведение ортогональных матриц также является ортогональной, обратная к ней Q также ортогональна. С учетом полученного разложения, исходная система уравнений (5) запишется в виде

$$QUx = b,$$

$$\begin{array}{ccc} & \uparrow & \uparrow \\ & k & l \end{array}$$

Элементы матрицы P_{kl} задаются формулами

$$P_{ij} = \begin{cases} 0 & i \neq j, \quad i \neq k, \quad i \neq l, \\ 1 & i = j, \quad i \neq k, \quad i \neq l, \\ \cos \varphi & i = j, \quad i = k, \quad i = l, \\ \sin \varphi & i = k, \quad j = l, \\ -\sin \varphi & i = l, \quad j = k. \end{cases} \quad (36)$$

Матрица вращения является ортогональной. Действительно, нетрудно убедиться в том, что ее столбцы (так же, как и строки) образуют ортонормированную систему векторов:

$$\sum_{k=1}^n p_{kl} p_{km} = \begin{cases} 1 & l = m, \\ 0 & l \neq m, \end{cases}$$

следовательно, $P^T P = E$:

$$\sum_{k=1}^n p_{lk}^T p_{km} = \sum_{k=1}^n p_{kl} p_{km} = \begin{cases} 1 & l = m, \\ 0 & l \neq m, \end{cases}$$

Приведем сначала матрицу A к почти треугольному виду, когда все элементы в нижней части матрицы, кроме верхней диагонали, находящейся под главной, равны нулю, или все элементы в верхней части матрицы, кроме нижней диагонали, находящейся над главной, равны нулю. Такие матрицы называются верхними почти треугольными или нижними почти треугольными матрицами соответственно.

Умножим матрицу A слева на матрицы вращения $P_{32}^T, P_{42}^T, \dots, P_{n2}^T$, выбирая их таким образом, чтобы обнулить элементы $a_{31}, a_{41}, \dots, a_{n1}$ первого столбца. Затем умножим полученную матрицу на матрицы вращения $P_{43}^T, P_{53}^T, \dots, P_{n3}^T$ выбирая их так, чтобы обнулить элементы второго столбца матрицы. Продолжая указанный процесс, получим верхнюю почти треугольную матрицу

$$A^* = (P^*)^T A, \quad (37)$$

где

$$P^* = P_{32} \cdot P_{42} \cdots P_{n2} \cdot P_{43} \cdot P_{53} \cdots P_{n3} \cdots P_{nn-2}. \quad (38)$$

Получим теперь формулы для элементов указанных матриц вращения. Пусть на s -м шаге мы имеем матрицу A_s следующей структуры (звездочки соответствуют ненулевым элементам, пробелы - нулевым):

$$A_s = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * & * & * \\ & & & * & * & * & * & * \\ & & & & * & * & * & * \\ & & & & & * & * & * \\ & & & & & & * & * \\ & & & & & & & * \end{pmatrix},$$

$$\begin{array}{c} \uparrow \\ l-1 \end{array}$$

т.е.

$$a_{ij}^{(s)} = 0 \text{ при } j = 1, 2, \dots, l-2, i = j+2, j+3, \dots, n.$$

Подберем углы φ в матрицах вращения P_{kl} , $k = l+1, l+2, \dots, n$ так, чтобы после умножения на эти матрицы слева у матрицы A_s были обнулены элементы $a_{kl-1}^{(s)}$, $k = l+1, l+2, \dots, n$.

Пусть $\bar{A} = A_{s+k-l-1}$, $\tilde{A} = P_{kl}^T \bar{A}$. Имеем

$$\tilde{a}_{ij} = \sum_{m=1}^n p_{im}^T \bar{a}_{mj} = \sum_{m=1}^n p_{mi} \bar{a}_{mj}.$$

В соответствии с (36), если $m \neq k$, $m \neq l$, то

$$p_{mi} = \begin{cases} 1 & m = i, \\ 0 & m \neq i, \end{cases}$$

следовательно, при $i \neq k$, $i \neq l$

$$\tilde{a}_{ij} = \sum_{m=1}^n p_{mi} \bar{a}_{mj} = p_{ii} \bar{a}_{ij} = \bar{a}_{ij}.$$

При $i = k$ имеем:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{kj} &= \sum_{m=1}^n p_{mk} \bar{a}_{mj} = p_{kk} \bar{a}_{kj} + p_{kl} \bar{a}_{lj} = \\ &= \bar{a}_{kj} \cos \varphi + \bar{a}_{lj} \sin \varphi, \quad j = 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (39)$$

а при $i = l$:

$$\begin{aligned} \tilde{a}_{lj} &= \sum_{m=1}^n p_{ml} \bar{a}_{mj} = p_{ll} \bar{a}_{lj} + p_{lk} \bar{a}_{kj} = \\ &= \bar{a}_{lj} \cos \varphi - \bar{a}_{kj} \sin \varphi, \quad j = 1, 2, \dots, n, \end{aligned} \quad (40)$$

т.е. изменяются элементы лишь k -й и l -й строк.

Отметим, что при указанных преобразованиях нулевые элементы в левой нижней части матрицы останутся нулевыми. Действительно, из (39), (40) вытекает, что если $\bar{a}_{kj} = 0$, $j = 1, 2, \dots, l-2$, то $\tilde{a}_{lj} = 0$, $j = 1, 2, \dots, l-2$.

Далее, из (39) при $j = l-1$ имеем

$$\tilde{a}_{kl-1} = \bar{a}_{kl-1} \cos \varphi + \bar{a}_{l-1} \sin \varphi = 0,$$

если

$$\varphi = \begin{cases} -\operatorname{arctg} \frac{\bar{a}_{kl-1}}{\bar{a}_{l-1}} & \bar{a}_{l-1} \neq 0, \\ \frac{\pi}{2} & \bar{a}_{l-1} = 0. \end{cases} \quad (41)$$

При этом, если $\bar{a}_{kl-1} = 0$, то $P_{kl} = E$; если же $\bar{a}_{l-1} = 0$, то $\varphi = \pi/2$ для всех обнуляемых элементов $(l-1)$ -го столбца.

Аналогичным образом осуществляется приведение матриц к нижнему почти треугольному виду.

