Получим

$$\begin{array}{rcl} x_s + u_{s,s+1}x_{s+1} + \cdots + u_{s,n}x_n &=& y_s \\ a^{(s)}_{s+1,s+1}x_{s+1} + \cdots + a^{(s)}_{s+1,u}x_n &=& f^{(s)}_{s+1} \\ \cdots && \\ a^{(s)}_{n,s+1}x_{s+1} + \cdots + a^{(s)}_{n,n}x_n &=& f^{(s)}_n, \end{array}$$

где

$$\begin{array}{rcll} a^{(s)}_{ij} &=& a^{(s-1)}_{i,j} - a^{(s-1)}_{i,s}u_{s,j} & ; \quad i,j = \overline{s+1,n} \\ f^{(s)}_i &=& f^{(s-1)}_i - a^{(s-1)}_{i,s}y_s & ; \quad i,j = \overline{s+1,n} \end{array}$$

Таким образом прямой ход в методе Гаусса

$$Ax = F \Leftrightarrow Ux = y$$

осуществляется по формулам:

$$\begin{array}{ll} u_{s,j} = \frac{a^{(s-1)}_{s,j}}{a^{(s-1)}_{s,s}}, & s = 1,\ldots,n; \quad j = s+1,\ldots,n \\ a^{(s)}_{i,j} = a^{(s-1)}_{i,j} - a^{(s-1)}_{i,s}u_{s,j}, & i,j = s+1,\ldots,n; \quad s = 1,\ldots,n-1 \end{array} \tag{4}$$

для матрицы и для правой части по формулам:

$$\begin{array}{ll} y_s = \frac{f^{(s-1)}_s}{a^{(s-1)}_{s,s}}; & s = 1,\ldots,n; \quad f^{(0)}_s = f_s \\ f^{(s)}_i = f^{(s-1)}_i - a^{(s-1)}_{i,s}y_s; & i = s+1,\ldots,n; \quad s = 1,\ldots,n-1 \end{array} \tag{5}$$

б) *Обратный ход* метода Гаусса. Теперь решаем систему $Ux = y$ с верхне-треугольной матрицей, причём $u_{ii} = 1$:

$$\begin{cases} x_n = y_n \\ x_i = y_i - \sum\limits_{j=i+1}^{n} u_j x_j, \quad i = \overline{n-1,1} \end{cases} \tag{6}$$

Замечание. Формулы (4),(5) и (6) решают задачу (1). Число наиболее продолжительных арифметических действий — умножений-делений порядка $O(\frac{n^3}{3})$ и столько же сложений-вычитаний. Таким образом $O(\frac{2n^3}{3})$ арифметических действий необходимо для осуществления метода последовательного исключения неизвестных.

2.2 LU - разложение невырожденной матрицы

При реализации метода Гаусса на каждои шаге исключения мы полагали $a^{(s-1)}_{s,s} \neq 0$. Формулы (4) и (5) можно интерпритировать так, будто имеет место представление $f = Ly$ с нижней треугольной матрицей L

$$Ux = y = L^{-1}f \Leftrightarrow LUx = f \quad \text{т.е. } A = LU.$$

Это не случайно, однако само разложение мы получили по-другому (заодно и ответим на вопрос обоснования метода Гаусса).

Обозначим через Δ_i - главный угловой минор i-го порядка матрицы A. Тогда имеет место:

Теорема.(*LU-разложение) Пусть все угловые миноры матрицы A отличны от нуля, т.е. $\forall i\ \Delta_i \neq 0$, $i = 1,...n$. Тогда матрицу A можно единственным способом представить в виде произведения $A = LU$, где L — невырожденная нижне-треугольная матрица; U — невырожленная верхне-треугольная матрица с единичной диагональю $u_{ii} = 1$.*

Доказательство: При $n = 1$ разложение очевидно

$$a_{11} = (a_{11}) \cdot (1).$$

Пусть оно верно для $n = s - 1$, т. е.

$$A_{s-1} = L_{s-1} \cdot U_{s-1} \quad \text{и} \quad (U_{s-1})_{ii} = 1; \quad i = 1, \ldots, s-1.$$

Докажем, что наше утверждение верно для $n = s$. Для этого выделим в A_s удобную блочную структуру:

$$A_s = \left(\begin{array}{cccc|c} & & & & a_{1,s} \\ & & & & \cdot \\ & A_{s-1} & & & \cdot \\ & & & & a_{s-1,s} \\ \hline a_{s,1} & \cdots & a_{s,s-1} & & a_{s,s} \end{array} \right) \text{,введем обозначения} \begin{array}{rcl} \vec{b} & = & (a_{s,1}, \ldots, a_{s,s-1}); \\ \vec{c} & = & (a_{1,s}, \ldots, a_{s-1,s})^T. \end{array}$$

Аналогичное разбиение на блоки выполним для матриц L_s и U_s. Вычислим L_sU_s и потребуем

$$A_s = \left(\begin{array}{cccc|c} & & & & 0 \\ & & & & \cdot \\ & L_{s-1} & & & \cdot \\ & & & & 0 \\ \hline l_{s,1} & \cdots & l_{s,s-1} & & l_{s,s} \end{array} \right) \cdot \left(\begin{array}{cccc|c} & & & & u_{1,s} \\ & & & & \cdot \\ & U_{s-1} & & & \cdot \\ & & & & u_{s-1,s} \\ \hline 0 & \cdots & 0 & & 1 \end{array} \right) \Leftrightarrow$$

$$\left\{ \begin{array}{rcl} L_{s-1}U_{s-1} & = & A_{s-1} \\ L_{s-1}\vec{u} & = & \vec{c} \\ \vec{l}U_{s-1} & = & \vec{b} \\ \vec{l}\vec{u} + l_{ss} & = & a_{ss} \end{array} \right. \Leftrightarrow \left\{ \begin{array}{rcl} \vec{u} & = & L_{s-1}^{-1}\vec{c} \\ \vec{l} & = & \vec{b}(U_{s-1})^{-1} \\ l_{s,s} & = & a_{s,s} - \vec{l}\vec{u} \end{array} \right.$$

Мы использовали обозначения $\vec{l}$ и $\vec{u}$ для соответствующие векторов

$$\begin{array}{rcl} \vec{l} & = & (l_{s,1}, \ldots, l_{s,s-1}); \\ \vec{u} & = & (u_{1,s}, \ldots, u_{s-1,s})^T. \end{array}$$

Теперь покажем, что:

1)L_s - невырожденная матрица, (т.е. $l_{i,i} \neq 0$). Нам нужно показать, что $l_{s,s} \neq 0$. Остальные диагональные элементы матрицы L ненулевые по предположению индукции. Имеем

$$detA_s = \Delta_s = det(L_sU_s) = detL_{s-1}l_{s,s}\underbrace{detU_{s-1}}_{\equiv 1}\cdot 1 = detL_{s-1}\cdot l_{s,s} \neq 0.$$

Таким образом $l_{s,s} \neq 0$.

2) Разложение единственно (*от противного*). Пусть их два

$$A = \bar{L}\bar{U} = \tilde{L}\tilde{U} \Rightarrow \tilde{L}^{-1}\bar{L} = \tilde{U}\bar{U}^{-1}.$$

Здесь $\tilde{L}^{-1}\bar{L}$ — нижне-треугольная матрица, а $\tilde{U}\bar{U}^{-1}$ — верхне-треугольная матрица (с единичной диагональю). Таким образом $\tilde{L}^{-1}\bar{L}$ и $\tilde{U}\bar{U}^{-1}$ диагональные матрицы, но одна из них единиченая E

$$\tilde{L}^{-1}\bar{L} = E \Leftrightarrow \bar{L} = \tilde{L}; \quad \tilde{U}\bar{U}^{-1} = E \Leftrightarrow \tilde{U} = \bar{U} \quad \blacksquare$$

Замечания:

1) Как мы видим метод исключений Гаусса можно применять если все $\Delta_i \neq 0$. Известно, что если матрица A невырождена, $detA \neq 0$, то существует матрица перестановок P (не единственная!) такая, что PA (при перестановке строк A матрицы) имеет ненулевые главные миноры ($\Delta_i(PA) \neq 0$) и, следовательно, $PA = LU$ (единственным образом). В таком случае к системе

$$PA = Pf$$

и далее применим метод исключения Гаусса.

Один из способов реализации допустимой матрицы перестановок P — исключение с выбором главного элемента (т.е. элемента с максимальным модулем для исключения на соответствующем шаге) по строке или по столбцу (или по всей матрице). Такое исключение дает нужную перестановку уравнений. Окончательно

$$P = \prod_{(k,e)} P_{k,l}$$

где $P_{k.l}$ - матрица перестановки k, l строк (или столбцов).

2)**Задача.** Получить формулы *метода квадратного корня* (метода Холецкого). Пусть $A > 0$; $\quad A^T = A$, тогда

$$A = L\,L^T.$$

2.3 Вычисление определителя и обратной матрицы

Построенное LU-разложения для матрицы A позволяет решить вопрос о нахождении определителя и обратной матрицы для матрицы A.

Определитель матрицы. Обычно стандартные процедуры одновременно с построением решения СЛАУ вычисляют и определитель матрицы A. Пусть в процессе исключений найдено LU-разложение для A: $A = LU$, тогда

$$detA = det(LU) = detL \cdot detU = l_{11} .... l_{nn}. \tag{7}$$

Если при исключении выполнялись перестановки, то

$$det(PA) = (-1)^{N(p)} detA$$

где $N(P)$ — число выполненных перестановок.
Если A вырожденная матрица, $detA = 0$, то на некотором, s-ом шаге исключения, $a_{s,i}^{(s-1)} = 0, i = \overline{s,n}$, что и завершает процесс исключения. При этом мы можем определилить $rangA$ и построить базисные столбцы матрицы A.

Обращение матрицы. После получения LU-разложения для обращения матрицы A решают матричное уравнение

$$AX = E.$$

Решение X даёт A^{-1}. Относительно векторов $\vec{x}_k = (X)_k^i, \quad i = 1, \dots, n$ — столбцов матрицы X имеем n систем

$$AX_k = E_k. \tag{8}$$

При этом для решения системы (8) разложение A строится один раз(!). Общее число мультипликативных действий $O(n^3)$ "всего в три раза больше (!)", чем для решения исходной системы линейных уравнений.

§3. Метод "прогонки" решения СЛАУ ленточного вида

3.1 LU-разложение ленточной матрицы

Частным, но важным с точки зрения приложений, является случай СЛАУ со специального вида матрицей:

$$a_{i,j} = 0, \qquad \text{если } |i - j| > k$$

т.е. матрица "ленточного" вида относительно главной диагонали, с широтой ленты $(2k+1)$ элемент. Любая матрица ленточная, но интересен случай, когда $(2k+1) \ll n$. Мы ограничимся рассмотрением случай $k = 1$, т.е. ширина ленты $2k + 1 = 3$. Это случай $3^{\text{х}}$-диагональной матрицы.
Удобства работ с ленточными матрицами объясняется прежде всего:

а) компактностью способа их хранения — требуется хранить не более $n * (2k + 1)$ элементов (даже меньше), а не n^2 как в обычном случае;

б) структурой LU-разложения. Имеет место

Теорема. *Если матрица A с шириной ленты $(2k+1)$ имеет LU-разложение*[*1)], *то L и U — соответствующие треугольные ленточные матрицы*

$$\begin{array}{l} l_{i,j} \neq 0, \quad j = i-k, \dots, i \\ u_{i,j} \neq 0, \quad j = i, \dots, i+k; \quad u_{i,i} = 1. \end{array}$$

Существенное замечание. При работе с ленточными матрицами крайне невыгодна перестановка уравнений, поскольку при этом увеличивается ширина ленты. Ограничимся рассмотрением случая 3[-х]-диагональной матрицы A, для которого реализация LU-разложения носит название *метода прогонки.*

3.2 Формулы прогонки

Рассмотрим СЛАУ $Ax = f$ с трехдиагональной матрицей A

$$A = \begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

Главную и побочные диагонали матрицы обозначим b, a и c. Запишем СЛАУ $Ax = f$ в развернутом виде:

$$\begin{array}{rcl} a_i x_{i-1} + b_i x_i + c_i x_{i+1} & = & f_i, \quad i = 1, n \\ a_1 & = & 0 \\ c_n & = & 0. \end{array} \tag{9}$$

Построим формулы LU-разложения:

$$L = \begin{pmatrix} \beta_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \alpha_2 & \beta_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \alpha_n & \beta_n \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 1 & \gamma_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \gamma_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & \gamma_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}, A = LU.$$

Поэлементно получаем:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \beta_1 \cdot 1 & = & b_1 \\ \beta_1 \cdot \gamma_1 & = & c_1 \end{array} \right. \qquad \text{и} \qquad \left\{ \begin{array}{rcl} \alpha_k \cdot 1 & = & a_k \\ \alpha_k \cdot \gamma_{k-1} + \beta_k \cdot 1 & = & b_k \\ \beta_k \cdot \gamma_k & = & c_k. \end{array} \right.$$

Формулы прогонки:

$$\begin{array}{rcl} \alpha_k & = & a_k; \quad k = 2, \dots, n \\ \beta_1 & = & b_1 \\ \gamma_1 & = & \frac{c_1}{\beta_1} \\ \beta_k & = & b_k - \alpha_k \cdot \gamma_{k-1} = b_k - a_k \cdot \gamma_{k-1}; \quad k = 2, \dots, n \\ \gamma_k & = & \frac{c_k}{\beta_k} : \quad k = 2, \dots, (n-1) \end{array} \tag{10}$$

[*1)] в этом случае перестановки делать нельзя!

LU-разложение построено. Собственное решение (9) строим в два этапа:
а)*прямой ход* прогонки — находим y из $Ly = f$

$$\begin{array}{rcl} y_1 & = & \frac{f_1}{\beta_1} \\ y_k & = & \frac{(f_k - a_k \cdot y_{k-1})}{\beta_k}: \quad k = 2, \ldots, n. \end{array} \tag{11}$$

б)*обратный ход* — находим x из $Ux = y$

$$\begin{array}{rcl} x_n & = & y_n \\ x_k & = & y_k - \gamma_k \cdot x_{k+1}: \quad k = (n-1), \ldots, 1. \end{array} \tag{12}$$

Замечания:
1) Рассмотрим достаточные условия существования и единственности LU-разложения (10) — условие $\beta_k \neq 0$, $\forall k$. Покажем, что если выполнено условие диагонального преобладания элементов матрицы A, т.е. $|b_i| \geq |a_i| + |c_i|$ и $|a_i| \neq 0$, то $\beta_k \neq 0$, $\forall k$ (т.е. разложение (10) возможно и единственно). Еще раз подчеркнем, что мы не можем делать перестановок в матрице A. Заметим, что если $|\gamma_{k-1}| < 1$ при некотором k, то далее все $\beta_k \neq 0$ и все $|\gamma_k| < 1$ до γ_{n-1}. Действительно:

$$|\beta_k| = |b_k - a_k \cdot \gamma_{k-1}| \geq |b_k| - |a_k| \cdot |\gamma_{k-1}| \geq \underbrace{|a_k|(1 - |\gamma_{k-1}|)}_{>0} + \underbrace{|c_k|}_{\geq 0} > 0.$$

Теперь заметим

$$|\gamma_k| = \frac{|c_k|}{|b_k - a_k\gamma_{k-1}|} \leq \frac{|c_k|}{|b_k| - |a_k| \cdot |\gamma_{k-1}|} \leq \frac{|c_k|}{|a_k| + |c_k| - |a_k| \cdot |\gamma_{k-1}|} < 1$$

Поскольку по условию $|b_i| \geq |a_i| + |c_i| > 0$, а в дроби $\frac{|c_k|}{|a_k|+|c_k|-|a_k|\cdot|\gamma_{k-1}|}$ выражение $|a_k|(1 - |\gamma_{k-1}|) \neq 0$ ($|a_k| \neq 0$ по условию). Найдем $|\gamma_1|$ из (10), полагая $|\gamma_0| = 0$ (этот коэффициент не используется). Тогда $|\gamma_1| < 1$ ■
2) *Матричная прогонка.* В задаче разностной аппроксимации систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка мы сталкиваемся с ситуацией аналогичной LU-разложению (10). Приходится строить разложение трехдиагональной матрицы A блочной структуры, когда блоки $[a].[b]$ и $[c]$ сами являются $p \times p$-матрицами (p определяется числом уравнений в системе). Опуская формулы LU-разложения приведем аналог системы (10):

$$\begin{array}{rcl} [\beta_1][1] = [B_1] & \Leftrightarrow & [\beta_1] = [B_1] \\ [\beta_1][\gamma_1] = [C_1] & \Leftrightarrow & [\gamma_1] = [\beta_1]^{-1} C_1 \\ [\alpha_k][1] = [A_k] & \Leftrightarrow & [\alpha_k] = [A_k] \\ [\alpha_k][\gamma_{k-1}] + [\beta_k][1] = [B_k] & \Leftrightarrow & [\beta_k] = [B_k] - [A_k][\gamma_{k-1}] \\ [\beta_k][\gamma_k] = [C_k] & \Leftrightarrow & [\gamma_k] = [\beta_k]^{-1}[C_k]. \end{array} \tag{13}$$

Задача.*Записать для рассматриваемого случая аналог формул прогонки (10). Построить формулы решения прямого хода (14) и обратного — (15).*

§4. Итерационные методы решения СЛАУ

4.1 Одношаговые итерационные методы. Основные понятия

Одним из наиболее эффективных приемов решения СЛАУ (1)

$$Ax = f$$

высокого порядка, в частности, СЛАУ, возникающие при разностной аппроксимации дифференциальных уравнений (как правило с ленточными матрицами), являются *итерационные* методы.

Если для получения приближения решения (1) на очередной итерации (на очередном шаге итерационного процесса) используется лишь предыдущее значение x, то такой итерационный метод называется *одношаговым* (или двуслойным).

Мы ограничимся рассмотрением одношаговых итерационных методов, каноническая форма записи которых представляется в виде:

$$B_{n+1}\frac{x_{n+1}-x_n}{\tau_{n+1}} + Ax_n = f, \quad n = 0, 1, .. \tag{16}$$

$$x_0 = x^0.$$

Здесь B_{n+1} ($detB_{n+1} \neq 0, \forall n$) и $\tau_{n+1} > 0$ — итерационные матрица и параметр. Основное внимание мы уделим *стационарным* итерационным методам, т.е. $B_{n+1} = B; \tau_{n+1} = \tau > 0$. Если $B \neq E$, то метод называется *неявным*. Точность итерационного метода характеризуется величиной нормы *погрешности* решения на n-ой итерации

$$z_n = x_n - x; \quad x_n = x + z_n; \tag{16}$$

где x — решение (1), z_n — погрешность n-ой итерации.

Поскольку (16) линейное относительно x уравнение, то погрешность z_n удовлетворяет однородному уравнению:

$$B_{n+1}\frac{(x+z_{n+1})-(x+x_n)}{\tau^{n+1}} + A(x+z_n) = f \Leftrightarrow B_{n+1}\frac{z_{n+1}-z_n}{\tau^{n+1}} + Az_n = 0. \tag{17}$$

Для неявного итерационного метода (16) естественно потребовать, чтобы решение задачи для x_{n+1}

$$B_{n+1}x_{n+1} = B_{n+1}x_n + \tau^{n+1}(f - Ax_n) \equiv F_n$$

требовало бы меньшего объема вычислений, чем прямое решение $Ax = f$.

Запишем (16) в форме *метода последовательных приближений* (МПП):

$$x_{n+1} = B_{n+1}^{-1}(B_{n+1} - \tau_{n+1}A)x_n + B_{n+1}^{-1}\tau_{n+1}f = \left|\begin{array}{l}\text{для стационар-}\\\text{ного}\\\text{итерационного}\\\text{метода}\end{array}\right| =$$

$$= B^{-1}(B - \tau A)x_n + \tau B^{-1}f \equiv Cx_n + g \tag{16*}$$

где $C = E - \tau B^{-1}A$ — матрица перехода к очередной итерации.