Розділ 2

Прямі методи розв'язання систем лінійних рівнянь

- Метод Гаусса
- LU-розкладання матриці
- Метод Холецького
- Уточнення розв'язку
- Обчислення оберненої матриці
- Аналіз точності розв'язку систем
- Числа обумовленості
- Методи розв'язання перевизначених систем

До чисельних методів лінійної алгебри належать методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь, обернення матриць, обчислення визначників і знаходження власних значень і власних векторів матриць. Завдяки використанню локальної лінеаризації нелінійних залежностей переважна більшість задач обчислювальної математики зводиться до розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь. У лінійній алгебрі таку задачу називають першою основною задачею. До неї належать задачі обчислення визначників і обчислення елементів оберненої матриці. Іноді обчислення визначників і елементів оберненої матриці називають другою і третьою основними задачами лінійної алгебри.

2.1. Основні поняття

Нагадаємо основні поняття, що використовуються в цьому розділі. Систему лінійних алгебраїчних рівнянь подамо у такому вигляді:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + ... + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + ... + a_{2n}x_n = b_2, \\ \quad ... \quad ... \quad ... \quad ... \quad ... \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + ... + a_{nn}x_n = b_n, \end{cases} \tag{2.1}$$

або

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i, \quad i = 1, ..., n.$$

Систему лінійних алгебраїчних рівнянь часто записують у матричній формі

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \tag{2.2}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & ... & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & ... & a_{2n} \\ ... & ... & ... & ... \\ a_{n1} & a_{n2} & ... & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ ... \\ b_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ ... \\ x_n \end{bmatrix},$$

де $\mathbf{A}$ — матриця коефіцієнтів системи, $\mathbf{b}$ — вектор вільних членів і $\mathbf{x}$ — вектор невідомих.

Якщо матриця $\mathbf{A}$ неособлива, тобто її визначник не дорівнює нулю, система (2.1) має єдиний розв'язок. У лінійній алгебрі звичайно використовують спосіб розв'язання системи рівнянь (2.2), що заснований на обчисленні оберненої матриці $\mathbf{A}^{-1}$. Дійсно, якщо помножити обидві частини рівняння (2.2) на матрицю $\mathbf{A}^{-1}$, то розв'язок рівняння отримаємо у вигляді

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}. \tag{2.3}$$

Елементи оберненої матриці a_{ij}^{-1} можна обчислити за відомою формулою (1.7)

$$a_{ij}^{-1} = \frac{A_{ij}}{\det \mathbf{A}},$$

де A_{ij} — алгебраїчне доповнення елемента a_{ij} матриці $\mathbf{A}$ і $\det \mathbf{A}$ — визначник цієї матриці. Тоді для знаходження всіх її елементів потрібно знайти значення n^2 визначників порядку n. Остання задача настільки трудомістка, що розв'язати її навіть для $n = 10$ дуже важко.

Менш трудомістким є метод Крамера, у якому значення невідомих x_i, $i = 1, 2, ..., n$ можна отримати за допомогою формули

$$x_i = \frac{\det \mathbf{A}_i}{\det \mathbf{A}}, \quad i = 1, 2, ..., n, \tag{2.4}$$

де матриця $\mathbf{A}_i$ формується з матриці $\mathbf{A}$ заміною її i-го стовпця на стовпець вільних членів. Але для розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь з n невідомими у такий спосіб потрібно обчислити $n+1$ визначників порядку n, що за великого значення n також є дуже трудомісткою операцією, оскільки для розв'язання лінійної системи рівнянь з n невідомими буде потрібно $nn!$ арифметичних операцій. Вже коли $n = 50$, такий об'єм обчислень практично недоступний сучасним комп'ютерам. Далі ми розглянемо більш зручні для обчислень методи.

Методи чисельного розв'язання системи рівнянь (2.1) діляться на дві групи: прямі та ітераційні. До першої групи належать наведені вище методи розв'язання систем лінійних алгебраїчних рівнянь. В прямих (або точних) методах кількість арифметичних дій, потрібних для отримання розв'язку $\mathbf{x}$ системи (2.1), є скінченним числом. Прикладом прямого методу є також *метод Гаусса*. Ітераційні методи полягають в тому, що розв'язок $\mathbf{x}$ системи (2.1) знаходять як границю послідовних наближень $\mathbf{x}^{(k)}$, коли $k \to \infty$, де k — номер ітерації.

Методи лінійної алгебри на сьогодні добре досліджені та описані в літературі. Є кілька математичних пакетів, з яких, як зазначалося вище, автори вибрали пакет Mathemtica для ілюстративних обчислень і викладок (*study cases*) з огляду на можливість виконувати за допомогою цього пакета операції в символьному вигляді.

Ще раз варто підкреслити, що наявність саме цього математичного пакета не є обов'язковою умовою використання даного підручника: просто без нього читачам доведеться сприймати чисельні приклади «на віру» або повторювати їх за допомогою наявних обчислювальних засобів.

Приклад 2.1

У пакеті Mathematica можна виконувати багато матричних операцій, які дозволяють дуже просто обчислювати визначник матриці, обернену матрицю і розв'язувати систему рівнянь за наведеними вище формулами (2.3), (2.4). Продемонструємо можливості пакета на простих прикладах. Введемо розширену матрицю системи рівнянь $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$:

```
In[]:= Ab = {{1, -6, 0.7, 9}, {0.9, 8, 0.56, 7}, {2, 1.7, 12, 0.8}};
       MatrixForm[Ab]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 1 & -6 & 0.7 & 9 \\ 0.9 & 8 & 0.56 & 7 \\ 2 & 1.7 & 12 & 0.8 \end{pmatrix}$$

Елементи розширеної матриці вводяться послідовно у вигляді списку. Для наочності вона зображена традиційно. Перші три стовпчики в ній — це матриця системи $\mathbf{A}$, останній стовпчик — вектор правих частин рівнянь $\mathbf{b}$. Виділимо з розширеної матриці матрицю системи $\mathbf{A}$:

```
In[]:= A = Ab[[{1, 2, 3}, {1, 2, 3}]]; MatrixForm[A]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 1 & -6 & 0.7 \\ 0.9 & 8 & 0.56 \\ 2 & 1.7 & 12 \end{pmatrix}$$

```
In[]:= b = Ab[[{1, 2, 3}, {4}]]
Out[]= {{9}, {7}, {0.8}}
```

Знайдемо визначник матриці $\mathbf{A}$:

```
In[]:= d = Det[A]
Out[]= 142.999
```

Він відмінний від нуля. За правилом Крамера знайдемо значення невідомих. Для цього замінимо в матриці системи **A** стовпець, що відповідає номеру невідомої, на стовпець правих частин системи рівнянь. Отримаємо таку матрицю для першої невідомої:

```
In[]:= A1 = A[[{1, 2, 3}, {4, 2, 3}]]; MatrixForm[A1]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 9 & -6 & 0.7 \\ 7 & 8 & 0.56 \\ 0.8 & 1.7 & 12 \end{pmatrix}$$

Тепер за правилом Крамера можемо знайти значення першої невідомої:

```
In[]:= x1 = Det[A1]/d
Out[]= 9.51471
```

Аналогічно знаходимо значення решти невідомих:

```
In[]:= A2 =A[[{1, 2, 3}, {1, 4, 3}]];
       x2 = Det[A2]/d
Out[]= -0.0899587

In[]:= x3 = Det[A[[{1, 2, 3}, {1, 2, 4,}]]]/d
Out[]= -1.50637
```

Використаємо для розв'язання системи формулу (2.3). Спочатку знайдемо обернену матрицю $\mathbf{A}^{-1}$, яку позначимо AI, а потім значення невідомих:

```
In[]:= AI = Inverse[A];
       x = AI . b
Out[]= {{ 9.51471}, { -0.0899587}, { -1.50637}}
```

Якщо це необхідно, можна вивести на екран і обернену матрицю:

```
In[]:= MatrixForm[AI]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 0.664676 & 0.511822 & -0.0626578 \\ -0.0676928 & 0.0741264 & 0.000489514 \\ -0.10119 & -0.0958049 & 0.0937069 \end{pmatrix}$$

Легко перевірити, що, помноживши цю обернену матрицю на її саму, отримаємо одиничну матрицю.

```
In[]:= MatrixForm[AI . A]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 1. & -6.4115\times 10^{-16} & -2.90891\times 10^{-16} \\ 0. & 1. & 1.01136\times 10^{-17} \\ 1.175\times 10^{-17} & 8.32667\times 10^{-17} & 1. \end{pmatrix}$$

Похибки обчислення елементів оберненої матриці малі, і можна вважати, що зображена матриця є одиничною. Аналогічні команди і матричні операції присутні й в інших математичних пакетах. Розглянемо більш детально алгоритми, реалізовані такими матричними операціями.

2.2. Метод виключення Гаусса

Розв'язання системи лінійних алгебраїчних рівнянь методом Гаусса полягає в послідовному виключенні невідомих $x_1, x_2, ..., x_n$ із цієї системи. Припустимо, що визначник матриці $\mathbf{A}$ відмінний від нуля, що свідчить про те, що система (2.1) має єдиний розв'язок. Якщо $a_{11} \neq 0$, то, поділивши перше рівняння (2.1) на a_{11}, отримаємо:

$$x_1 + c_{12}x_2 + ... + c_{1n}x_n = y_1, \tag{2.5}$$

де

$$c_{1j} = \frac{a_{1j}}{a_{11}}, \quad j = 2, 3, ..., n, \qquad y_1 = \frac{b_1}{a_{11}}.$$

Розглянемо решту рівнянь системи (2.1)

$$a_{i1}x_1 + a_{i2}x_2 + ... + a_{in}x_n = b_i, \qquad i = 2, 3, ..., n \tag{2.6}$$

і у кожному з них виключимо невідому x_1, виконавши таку послідовність дій. Помножимо (2.5) на a_{i1} і віднімемо отримане рівняння від i-го рівняння системи (2.6), $i = 2, 3, ..., n$.
У результаті отримаємо таку систему рівнянь:

$$\begin{gathered}
x_1 + c_{12}x_2 + ... + c_{1j}x_j + ... + c_{1n}x_n = y_1, \\
a_{22}^{(1)}x_2 + ... + a_{2j}^{(1)}x_j + ... + a_{2n}^{(1)} = b_2^{(1)}, \\
... \quad ... \quad ... \quad ... \quad ... \\
a_{n2}^{(1)}x_2 + ... + a_{nj}^{(1)}x_j + ... + a_{nn}^{(1)}x_n = b_n^{(1)}.
\end{gathered} \tag{2.7}$$

Тут позначено

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - c_{1j}a_{i1}, \quad b_i^{(1)} = b_i - y_1a_{i1}, \quad i, j = 2, 3, ..., m. \tag{2.8}$$

У системі (2.7) невідома x_1 є тільки в першому рівнянні, тому надалі достатньо мати справу зі скороченою системою рівнянь:

$$\sum_{j=2}^{n} a_{ij}^{(1)}x_j = b_i^{(1)}, \quad i = 2, 3, ..., m. \tag{2.9}$$

У такий спосіб здійснено перший крок методу Гаусса. Якщо $a_{22}^{(1)} \neq 0$, то з системи (2.9) аналогічно можна виключити x_2 і перейти до системи, яка еквівалентна (2.1). При цьому перше рівняння системи (2.7) залишиться без змін.

Виключаючи послідовно в такий спосіб невідомі $x_3, x_4, ..., x_n$, прийдемо остаточно до системи рівнянь, яка має такий вигляд:

$$\begin{aligned} x_1 + c_{12}x_2 + c_{13}x_3 + ... + c_{1n}x_n &= y_1, \\ x_2 + c_{23}x_3 + ... + c_{2n}x_n &= y_2, \\ ... \quad ... \quad ... \quad ... \quad ... & \\ x_{n-1} + c_{n-1,n}x_n &= y_{n-1}, \\ x_n &= y_n. \end{aligned} \tag{2.10}$$

У матриці цієї системи, що еквівалентна системі (2.1), всі елементи, які розташовані нижче головної діагоналі, дорівнюють нулю. Такі матриці називаються *верхніми трикутними*, на відміну від *нижніх трикутних* матриць, у яких дорівнюють нулю всі елементи, розташовані вище головної діагоналі.

Перехід від системи (2.1) до системи (2.10) являє собою прямий хід методу Гаусса. Зворотний хід полягає в знаходженні невідомих $x_1, x_2, ..., x_n$ з системи (2.10). Це зробити дуже просто, оскільки матриця системи трикутна і за її допомогою можна послідовно, починаючи з x_n, знайти всі невідомі. Загальні формули зворотного ходу мають такий вигляд:

$$x_n = y_n, \quad x_i = y_i - \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij}x_j, \qquad i = n-1, n-2, ..., 1. \tag{2.11}$$

Тепер виведемо розрахункові формули прямого ходу. Припустимо, що виконані перші $k-1$ кроків, тобто вже виключені змінні $x_1, x_2, ..., x_{k-1}$. Тоді для виключення матимемо аналогічну (2.9) скорочену систему:

$$\begin{aligned} a_{kk}^{(k-1)}x_k + a_{k,k+1}^{(k-1)}x_{k+1} + ... + a_{kn}^{(k-1)}x_n &= b_k^{(k-1)}, \\ ... \quad ... \quad ... \quad ... \quad ... & \\ a_{nk}^{(k-1)}x_k + a_{n,k+1}^{(k-1)}x_{k+1} + ... + a_{nn}^{(k-1)}x_n &= b_n^{(k-1)}. \end{aligned} \tag{2.12}$$

Нехай $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$. Поділивши обидві частини k-го рівняння на $a_{kk}^{(k-1)}$, отримаємо

$$x_k + c_{k,k+1}x_{k+1} + ... + c_{kn}x_n = y_k, \tag{2.13}$$

де

$$c_{kj} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad y_k = \frac{b_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}},$$

$$j = k+1, k+2, ..., n.$$

Помножимо рівняння (2.13) на $a_{ik}^{(k-1)}$ і віднімемо отримане співвідношення з i-го рівняння скороченої системи (2.12), де $i = k+1, k+2, ..., n.$ У результаті група рівнянь (2.12) набуде такого вигляду:

$$\begin{aligned} x_k + c_{k,k+1}x_{k+1} + ... + c_{kn} \quad x_n &= y_k, \\ a_{k+1,k+1}^{(k)}x_{k+1} + ... + a_{k+1,n}^{(k)}x_n &= b_{k+1}^{(k)}, \\ ... \quad ... \quad ... \quad ... \quad ... \\ a_{n,k+1}^{(k)}x_{k+1} + ... + a_{nn}^{(k)} \quad x_n &= b_n^{(k)}. \end{aligned}$$

Отже, під час прямого ходу методу Гаусса коефіцієнти системи рівнянь обчислюються за наведеними нижче формулами:

$$\begin{gathered} a_{kj}^{(0)} = a_{kj}, \quad k, j = 1, 2, ..., n, \\ c_{ki} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad j = k+1, k+2, ..., n, \quad k = 1, 2, ..., n, \end{gathered} \tag{2.14}$$

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}c_{kj}, \quad i, j = k+1, k+2, ..., n, \quad k = 1, 2, ..., n-1. \tag{2.15}$$

Обчислення правих частин системи (2.10) здійснюється за такими формулами:

$$\begin{gathered} b_k^{(0)} = b_k, \quad y_k = \frac{b_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad k = 1, 2, ..., n, \\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}y_k, \quad i = k+1, k+2, ..., n. \end{gathered} \tag{2.16}$$

Основним обмеженням методу є припущення про те, що всі елементи $a_{kk}^{(k-1)}$, на які проводиться ділення на кожному кроці методу, відмінні від нуля. Елемент $a_{kk}^{(k-1)}$ називається ведучим елементом на k-му кроці виключення. Слід мати на увазі, що навіть якщо якийсь ведучий елемент не дорівнює нулю, а просто близький до нього, в процесі обчислень може відбуватися значне накопичення похибок. Уникнути цього дозволяє метод Гаусса з вибором головного елемента. Ідея методу полягає в тому, щоб на черговому кроці виключати ту невідому, коефіцієнт за якої найбільший за модулем. Отже, ведучим елементом тут вибирається головний, тобто найбільший за модулем елемент матриці. Тим самим, якщо $\det \mathbf{A} \neq 0$, то в процесі обчислень не відбуватиметься ділення на нуль.

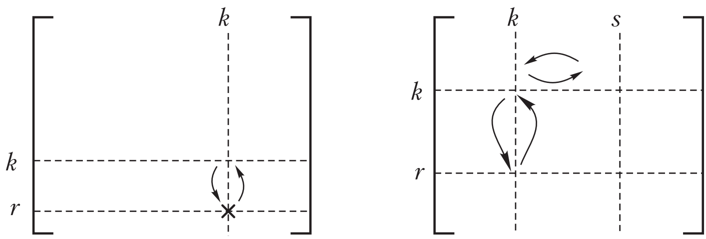
Для зменшення помилок округлювання чинять так. Серед елементів першого рядка $a_{kj}^{(k-1)}$ кожної проміжної матриці (2.12) вибирають найбільший за модулем елемент $\max |a_{kj}^{k-1}|$, $j = k, k+1, ..., n$ і роблять цей елемент ведучим. Вказаний спосіб виключення називається *методом Гаусса з вибором головного елемента по рядку*. Він еквівалентний застосуванню звичайного методу Гаусса до системи, в якій на кожному кроці виключення проводиться відповідна перенумерація змінних.

Застосовується також метод із вибором головного елемента *по стовпцю* (рис. 2.1, *а*). Він еквівалентний застосуванню звичайного методу Гаусса до системи, в якій на кожному кроці виключення проводиться відповідна перенумерація рівнянь.

$$\left|a_{rk}^{(k)}\right| = \max_{i}\left|a_{ik}^{(k)}\right|, \quad k \leqslant i \leqslant n. \tag{2.17}$$

Проте головний елемент можна вибирати і серед всіх елементів неперетвореної частини матриці (рис. 2.1, *б*):

$$\left|a_{rs}^{(k)}\right| = \max_{i,j}\left|a_{ij}^{(k)}\right|, \quad k \leqslant i, \quad j < n. \tag{2.18}$$



а *б*

Рис. 2.1. Вибір головного елемента: *а* – серед елементів стовпця матриці; *б* – серед елементів неперетвореної частини матриці

Визначимо складність алгоритму, що реалізує метод Гаусса на однопроцесорній ЕОМ. Розглянемо задачу розв'язання системи лінійних рівнянь з p правими частинами:

$$\mathbf{Ax}_1 = \mathbf{b}_1, ..., \mathbf{Ax}_p = \mathbf{b}_p.$$

На кожному k-му кроці прямого ходу Гаусса необхідно виконати $(n-k)$ ділень, $(n-k)(n-k+p+1)$ множень та додавань. Використовуючи формулу для ряду $1^2 + 2^2 + 3^2 + ... + m^2 = m(m+1)(2m+1)/6$, отримаємо

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

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

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

Під час зворотного ходу необхідно виконати n ділень та $\sum_{k=1}^{n}(k-1) = (n/2)(n-1)$ множень і додавань, тому, коли $p=1$, маємо

$$f_A(n) = n^3/3 + n^2 = O(n^3). \tag{2.19}$$

Отже, для реалізації методу Гаусса потрібно близько $n^3/3$ операцій множення. Це поліномний алгоритм, але навіть він для великої розмірності задачі ускладнює обчислювальний процес, про що свідчать дані табл. 2.1. У ній наведено тривалість прямого і зворотного ходів залежно від розмірності розв'язуваної системи рівнянь для комп'ютера з середньою швидкістю виконання операції ділення/множення 15 мкс.

Таблиця 2.1. Залежність часу прямого і зворотного ходів від розміру задачі

n	**Прямий хід, с**	**Зворотний хід, с**
10	0,005	0,0008
100	5	0,075
1000	5000 (1,5 год)	7,5

Алгоритм Гаусса є послідовним алгоритмом, орієнтованим на виконання на однопроцесорній ЕОМ.

2.3. Розкладання матриці на множники

2.3.1. Зв'язок методу Гаусса з розкладанням матриці на множники

Алгоритм Гаусса можна компактно записати в матричних позначеннях. Він відповідає розкладанню матриці $\mathbf{A}$ на добуток більш простих матриць. Спочатку для наочності розглянемо систему $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, що складається лише з трьох рівнянь:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{13}x_3 = b_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3. \end{cases} \tag{2.20}$$

Виключення невідомої x_1 з двох останніх рівнянь системи (2.20) здійснюється виконанням таких операцій:

- ділення першого рівняння на $a_{11} \neq 0$;
- віднімання перетвореного першого рівняння, помноженого на a_{i1}, від рівнянь $i = 2, 3$.

Перша операція еквівалентна множенню системи рівнянь зліва на діагональну матрицю

$$\mathbf{D}_1 = \begin{bmatrix} a_{11}^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix};$$

друга операція еквівалентна множенню зліва на матрицю

$$\mathbf{Q}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -a_{21} & 1 & 0 \\ -a_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Звідси випливає, що виключення x_1 рівносильно множенню системи зліва на матрицю, яку називають елементарною нижньою трикутною матрицею. Виконаємо вказані операції, використавши пакет Mathematica. Введемо матриці $\mathbf{A}_1$, $\mathbf{D}_1$, $\mathbf{Q}_1$ і вектор правих частин $\mathbf{b}$:

```
In[]:= A = Table[ai,j, {i,3}, {j,3}];
       B = Table[bj, {j,3}];
       D1 = {{a-1 1,1, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1}};
       Q1 = {{1, 0, 0},{-a2,1, 1, 0},{-a3,1, 0, 1}};
       L1 = Q1 . D1;
```

отримаємо матрицю $\mathbf{L}_1 = \mathbf{Q}_1\mathbf{D}_1$;

$$\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} 1/a_{11} & 0 & 0 \\ -a_{21}/a_{11} & 1 & 0 \\ -a_{31}/a_{11} & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Перетворимо за допомогою $\mathbf{L}_1$ початкову систему, тобто запишемо її у вигляді

$$\mathbf{L}_1\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{L}_1\mathbf{b}.$$

```
In[]:= A1 = L1 . A;
       B1 = L1 . B;
       X = {{x1}, {x2}, {x3}};
```

У результаті отримаємо систему рівнянь

$$\begin{bmatrix} 1 & \dfrac{a_{12}}{a_{11}} & \dfrac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{22} - \dfrac{a_{12}a_{21}}{a_{11}} & a_{23} - \dfrac{a_{13}a_{21}}{a_{11}} \\ 0 & a_{32} - \dfrac{a_{12}a_{31}}{a_{11}} & a_{33} - \dfrac{a_{13}a_{31}}{a_{11}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \dfrac{b_1}{a_{11}} \\ b_2 - \dfrac{b_1 a_{21}}{a_{11}} \\ b_3 - \dfrac{b_1 a_{31}}{a_{11}} \end{bmatrix}. \tag{2.21}$$

Перепишемо її у вигляді

$$\begin{cases} x_1 + a_{12}^{(1)}x_2 + a_{13}^{(1)}x_3 = y_1, \\ \qquad a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 = b_2^{(1)}, \\ \qquad a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 = b_3^{(1)} \end{cases} \tag{2.22}$$

і виконаємо другий крок методу Гаусса, тобто виключимо невідому x_2 з останнього рівняння. Це виконується множенням системи (2.22) зліва на елементарну матрицю

$$\mathbf{L}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1\big/a_{22}^{(1)} & 0 \\ 0 & -a_{32}^{(1)}\big/a_{22}^{(1)} & 1 \end{bmatrix}. \tag{2.23}$$

Переконаємося в цьому. Елементи $a_{ij}^{(1)}$ і $b_i^{(1)}$ в пакеті Mathematica позначимо через `a1ij` і `b1i`. Введемо матрицю і вектор правих частин системи (2.22), а також матрицю $\mathbf{L}_2$:

```
In[]:= A1 = {{1, a112, a113}, {0, a122, a123},{0, a132, a133}};
       B1 = {y1, b12, b13};
       L2 = {{1, 0, 0}, {0, 1/a122, 0}, {0, -a132/a122, 1}};
       A2 = L2 . A1;
       B2 = L2 . B1;
       X = {{x1}, x2}, {x3}}
```

У результаті отримаємо систему рівнянь

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & a_{22}^{(1)} \\ 0 & 1 & \dfrac{a_{23}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(1)} - \dfrac{a_{23}^{(1)}a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \dfrac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \\ b_3^{(1)} - \dfrac{b_2^{(1)}a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}} \end{bmatrix}. \tag{2.24}$$

Отже, після другого кроку виключення приходимо до системи (2.25), яку можна записати в такому вигляді:

$$\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{b}, \tag{2.25}$$

де матриці $\mathbf{L}_1$ і $\mathbf{L}_2$ визначені згідно з (2.21), (2.24). Нарешті, помноживши (2.25) на матрицю

$$\mathbf{L}_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1\big/a_{33}^{(2)} \end{bmatrix},$$

одержуємо систему

$$\mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{b}, \tag{2.26}$$

матриця якої

$$\mathbf{U} = \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A} \tag{2.27}$$

є верхньою трикутною матрицею з одиничною головною діагоналлю.

Перевіримо це, використовуючи пакет Mathematica. Обчислимо

$$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - \frac{a_{23}^{(1)} a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}},$$

$$y_2 = \frac{b_2^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}, \quad b_3^{(2)} = b_3^{(1)} - \frac{b_2^{(1)} a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$$

і визначимо $a_{33}^{(2)}, \mathbf{L}_3$:

```
In[]:= a233 = a133 - a123a132/a122;
       L3 = {{1, 0 ,0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1/a233}};
```

знайдемо добуток матриць $\mathbf{U} = \mathbf{L}_3\mathbf{A}_2 = \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A}$.

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & a_{22}^{(1)} \\ 0 & 1 & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Запишемо остаточну систему рівнянь:

```
In[]:= B2 = {y1, y2, b23};
       U = L3 . A2; B3 = L3 . B2;
```

$$\begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & a_{22}^{(1)} \\ 0 & 1 & a_{23}^{(2)} \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dfrac{b_3^{(2)}}{a_{33}^{(2)}} \end{bmatrix}.$$

З попереднього виразу випливає, що

$$\mathbf{A} = \mathbf{LU}, \tag{2.28}$$

де $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\mathbf{L}_3^{-1}$ — нижня трикутна матриця. Отже, LU-розклад матриці $\mathbf{A}$ можна отримати за допомогою елементарних трикутних матриць у такий спосіб: спочатку будують матриці $\mathbf{L}_1$, $\mathbf{L}_2$, $\mathbf{L}_3$ і обчислюють матрицю $\mathbf{U} = \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{L}_1\mathbf{A}$, а потім знаходять $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\mathbf{L}_3^{-1}$. Відзначимо, що обернені матриці $\mathbf{L}_k^{-1}$ мають простий вигляд:

```
In[]:= MatrixForm[Inverse[L1]]
       MatrixForm[Inverse[L2]]
       MatrixForm[Inverse[L3]]
```

$$\mathbf{L}_1^{-1} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & 1 & 0 \\ a_{31} & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & a_{22}^{(1)} & 0 \\ 0 & a_{32}^{(1)} & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_3^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} \end{bmatrix}. \tag{2.29}$$

При цьому матриця $\mathbf{L}$ є нижньою трикутною матрицею:

```
In[]:= L = Inverse[L1] . Inverse[L2] . Inverse[L3]
```

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 \\ a_{21} & a_{22}^{(1)} & 0 \\ a_{31} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(2)} \end{bmatrix}, \tag{2.30}$$

на головній діагоналі якої розташовані ведучі елементи методу виключення.

2.3.2. Умови застосування методу Гаусса

Все сказане можна перенести і на системи рівнянь довільного порядку. Процес виключення можна записати за допомогою формули

$$\mathbf{L}_n\mathbf{L}_{n-1}\ldots\mathbf{L}_1\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{L}_n\mathbf{L}_{n-1}\ldots\mathbf{L}_1\mathbf{b}, \tag{2.31}$$

де елементарна нижня трикутна матриця $\mathbf{L}_k$ на k-му кроці має вигляд

$$\mathbf{L}_k=\begin{bmatrix} 1 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & 1\big/a_{kk}^{(k-1)} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \ldots & -a_{k+1,k}^{(k-1)}\big/a_{kk}^{(k-1)} & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & -a_{nk}^{(k-1)}\big/a_{kk}^{(k-1)} & 0 & \ldots & 1 \end{bmatrix}. \tag{2.32}$$

Елементарна нижня трикутна матриця $\mathbf{L}_k$ здійснює виключення невідомої x_k з рівнянь із номерами $(k+1),(k+2),\ldots,n.$ Матриці $\mathbf{L}_k^{-1}$ існують і мають такий вигляд:

$$\mathbf{L}_k^{-1}=\begin{bmatrix} 1 & \ldots & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & a_{kk}^{(k-1)} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & \ldots & a_{k+1,k}^{(k-1)} & 1 & \ldots & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & \ldots & a_{nk}^{(k-1)} & 0 & \ldots & 1 \end{bmatrix}. \tag{2.33}$$

Очевидно, що матриці $\mathbf{L}_k$ існують, коли $a_{kk}^{(k-1)}\neq 0$ для кожного $k=1,2,\ldots,n.$ Остання умова буде виконана, якщо всі кутові мінори матриці $\mathbf{A}$ відмінні від нуля. Переконаємося в цьому. Позначимо через $|\mathbf{A}_m|$ кутовий мінор матриці $\mathbf{A}$ порядку m:

$$|\mathbf{A}_1|=a_{11},\ \ |\mathbf{A}_2|=\det\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix},\ \ \ldots,\ \ |\mathbf{A}_m|=\det\mathbf{A}.$$

Нехай $\mathbf{A}_m, \mathbf{L}_m, \mathbf{U}_m$ — матриці кутового мінору m-го порядку матриць $\mathbf{A}, \mathbf{L}, \mathbf{U}$, тобто:

$$\mathbf{L}_m = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22}^{(1)} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2}^{(1)} & a_{m3}^{(2)} & \dots & a_{mm}^{(m-1)} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}_m = \begin{bmatrix} 1 & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} & \dots & a_{1m}^{(1)} \\ 0 & 1 & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2m}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}.$$

Згідно з (2.28)

$$\mathbf{A}_m = \mathbf{L}_m \mathbf{U}_m .$$

Оскільки

$$\det \mathbf{U}_m = |\mathbf{U}_m| = 1, \quad \det \mathbf{L}_m = |\mathbf{L}_m| = a_{11} a_{22}^{(1)} a_{33}^{(2)} \dots a_{mm}^{(m-1)},$$

то

$$|\mathbf{A}_m| = |\mathbf{L}_m||\mathbf{U}_m| = a_{11} a_{22}^{(1)} a_{33}^{(2)} \dots a_{mm}^{(m-1)}.$$

Отже,

$$a_{mm}^{(m-1)} = \frac{|\mathbf{A}_m|}{|\mathbf{A}_{m-1}|} \neq 0, \quad m = 2, 3, \dots, n,$$

оскільки всі кутові мінори матриці $\mathbf{A}$ відмінні від нуля. Якщо хоча б один із кутових мінорів матриці $\mathbf{A}$ дорівнює нулю, то розглянутий вище LU-розклад неможливий. Це легко бачити на прикладі матриць другого порядку. Отже, метод Гаусса можна застосовувати тільки тоді, коли всі кутові мінори матриці $\mathbf{A}$ відмінні від нуля.

Запис методу Гаусса у вигляді (2.31) детально зображує процес виключення. Тепер його можна реалізувати інакше. Нехай задані матриця $\mathbf{A}$ і вектор $\mathbf{b}$. Спочатку проводиться розкладання $\mathbf{A}$ в добуток двох трикутних матриць, $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$. Початкова система набуває вигляду $\mathbf{LUx} = \mathbf{b}$, її розв'язання рівносильно послідовному розв'язанню систем рівнянь

$$\mathbf{Ly} = \mathbf{b}, \tag{2.34}$$

$$\mathbf{Ux} = \mathbf{y} \tag{2.35}$$

з трикутними матрицями, звідки й знаходять шуканий вектор $\mathbf{x}$. Розкладання $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ відповідає прямому ходу методу Гаусса, а розв'язання системи (2.34)–(2.35) — зворотному ходу.

Розглянутий вище алгоритм (2.31) приведення системи рівнянь до системи з верхньою трикутною формою ефективно реалізується на паралельних процесорах. Відомо, що систолічний алгоритм перемноження двох матриць розмірності $n \times n$ на SIMD-системі матричного типу реалізується за час, який дорівнює часу виконання n множень, $n-1$ додавань і $3(n-1)$ зсувів, тому зведення системи до вигляду (2.29), тобто прямий хід методу Гаусса, може бути реалізовано виконанням $5n^2 + n$ машинних операцій на матричному процесорі.

Приклад 2.2

Наведемо процедуру для пакета Mathematica, яка дозволяє отримати елементарні матриці виключення невідомих $\mathbf{L}_k$, виключити невідому x_k, обчислити матрицю $\mathbf{A}_k$ і вектор правої частини $\mathbf{b}_k$ системи рівнянь на k-му кроці перетворення Гаусса:

```
In[]:= LU[S_,b_,k_]:= Block[{j,d,P}, d = Dimension[S]; P = IdentityMatrix[d[[1]]];
       P[[k,k]] = 1/S[[k,k]];
       If [Abs[S[[k,k]]] ≤ 10^(-8), Print["ak,k =", S[[k,k]],", k =",k]; Abort[] ];
       Do [P[[j,k]] = -S[[j,k]]/S[[k,k]],{j, k+1, d[[1]]} ];
       Lk = -P; Ak = P . S; bk = P . b];
```

Розглянемо приклад її використання. Введемо матрицю і вектор правої частини системи:

```
In[]:= A = {{9, 3, 1}, {-3, 4, 5}, {8, 2, 7}};
       b = Transpose[{6, -4, 5}];
```

Отримаємо всі $\mathbf{L}_k, \mathbf{A}_k, \mathbf{b}_k,\ k = 1, 2, 3.$

```
In[]:= SA = A; sf = b; Do[LU[SA,sf,i]; sf = bi; SA = Ai, {i,3}];
```

Надрукуємо $\mathbf{L}_k$:

```
In[]:= Print["L1 = ",MatrixForm[L1], "L2 = ",MatrixForm[L2], "L3 = ",MatrixForm[L3]];
```

$$L_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{9} & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ -\frac{8}{9} & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{5} & 0 \\ 0 & \frac{2}{15} & 1 \end{pmatrix}; \quad L_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{45}{307} \end{pmatrix}$$

За формулою (2.27) обчислимо матрицю $\mathbf{U}$:

```
In[]:= U = L1 . L2 . L3 . A; Print["U = ", MatrixForm[U]]
```

$$U = \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{3} & \frac{1}{9} \\ 0 & 1 & \frac{16}{15} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Далі визначимо матрицю $\mathbf{L}$:

```
In[]:= L = Inverse[L1] . Inverse[L2] . Inverse[L3]; Print["L =", MatrixForm[L]]
```

$$L = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 0 \\ -3 & 5 & 0 \\ 8 & -\frac{2}{3} & \frac{307}{45} \end{pmatrix}$$

І нарешті за формулою (2.34) знайдемо вектор $\mathbf{y}$:

```
In[]:= y = b3; Print["y = ", MatrixForm[y]]
```

$$y = \begin{pmatrix} \frac{2}{3} \\ -\frac{2}{5} \\ -\frac{27}{307} \end{pmatrix}$$

За формулою (2.35) знайдемо вектор розв'язку **x**:

```
In[]:= x = Inverse[U] . y; Print["x = ", MatrixForm[x]]
```

$$x = \begin{pmatrix} \frac{239}{307} \\ -\frac{94}{307} \\ -\frac{27}{307} \end{pmatrix}$$

Розв'яжемо ту ж саму задачу за допомогою стандартного оператора Mathematica:

```
In[]:= LinearSolve[A, b]
```

Out[]= $x = \left\{\left\{\frac{239}{307}\right\}, \left\{-\frac{94}{307}\right\}, \left\{-\frac{27}{307}\right\}\right\}$

2.3.3. Матрична форма методу Гаусса з вибором головного елемента

Можна отримати формальний запис методу Гаусса з вибором головного елемента, використовуючи матриці перестановок, які визначаються таким чином.

Матрицею перестановок **P** називається квадратна матриця, у якої в кожному рядку і в кожному стовпці наявний лише один відмінний від нуля і рівний одиниці елемент.

Елементарною матрицею перестановок $\mathbf{P}_{ki}$ називається матриця, отримана з одиничної матриці перестановкою k-го і i-го рядків. Наприклад, елементарними матрицями перестановок третього порядку є матриці

$$\mathbf{P}_{12} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}_{13} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}_{23} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Перелічимо властивості елементарних матриць перестановок, що випливають з їх визначення.

1. Добуток двох (а отже, і будь-якої кількості) елементарних матриць перестановок є матрицею перестановок (не обов'язково елементарною).

   Наведемо приклади, використовуючи пакет Mathematica:

```
In[]:= P12 = {{0, 1, 0}, {1, 0, 0}, {0, 0, 1}};
       P13 = {{0, 0, 1}, {0, 1, 0}, {1, 0, 0}};
       P23 = {{1, 0, 0}, {0, 0, 1}, {0, 1, 0}};
       MatrixForm[P12 . P13]
       MatrixForm[P12 . P23]
```

$$\mathbf{P}_{12}\mathbf{P}_{13} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{P}_{12}\mathbf{P}_{23} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

2. Матрицю $\mathbf{P}_{ki}\mathbf{A}$ отримують із матриці **A** перестановкою k-го і i-го рядків.

3. Матрицю $\mathbf{AP}_{ki}$ отримують із матриці $\mathbf{A}$ перестановкою k-го і i-го стовпців. Нижче наведені відповідні приклади:

```
In[]:= A = Table[aij, {i,3}, {j,3}];
       MatrixForm[A]
       MatrixForm[P12 . A]
       MatrixForm[A . P12]]
```

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad \mathbf{P}_{12}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \quad \mathbf{AP}_{12} = \begin{bmatrix} a_{12} & a_{11} & a_{13} \\ a_{22} & a_{21} & a_{23} \\ a_{32} & a_{31} & a_{33} \end{bmatrix}.$$

Приклад 2.3

Розв'яжемо систему рівнянь методом Гаусса з вибором головного елемента по стовпцю:

$$\begin{aligned} 2x_1 - 5x_2 + 4x_3 &= 1, \\ 3x_1 + 2x_2 - x_3 &= 8, \\ 4x_1 - x_2 - 2x_3 &= -3. \end{aligned}$$

У першому стовпці найбільший елемент знаходиться в третьому рядку. Переставимо ці рядки за допомогою матриці $\mathbf{P}_{13}$:

```
In[]:= A = {{2, -5, 4}, {3, 2, -1}, {4, -1, 2}};
       b = {1, 8, 3};  X = {x1, x2, x3};
       P13 = {{0, 0, 1}, {0, 1, 0}, {1, 0, 0}};
       A1 = P13 . A; b1 = b . P13;
```

Отже, ми ввели матрицю $\mathbf{A}$ і вектор правої частини початкової системи рівнянь, переставили рядки і отримали нову матрицю $\mathbf{A}_1$, вектор $\mathbf{b}_1$ і систему рівнянь

$$\mathbf{P}_{13}\mathbf{Ax} = \mathbf{P}_{13}\mathbf{b}$$

```
In[]:= Print[ MatrixForm[A1], MatrixForm[X], "=", MatrixForm[b1]]
```

$$\begin{pmatrix} 4 & -1 & -2 \\ 3 & 2 & -1 \\ 2 & -5 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_3 \\ x_2 \\ x_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 \\ 8 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Виключимо невідому x_1 з двох останніх рівнянь. Для цього введемо елементарну нижню матрицю $\mathbf{L}_1$ і перетворимо систему з її допомогою. В результаті переходимо до системи

$$\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{Ax} = \mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{b}$$

```
In[]:= L1 = {{0.25, 0, 0}, {-0.75, 1, 0}, {-0.5, 0, 1}};
       A2 = L1 . A1; b2 = L1 . b1;
       Print[MatrixForm[A2], MatrixForm[X], "=", MatrixForm[b2]]
```

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.25 & -0.5 \\ 0 & 2.75 & 0.5 \\ 0 & -4.5 & 5.0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.75 \\ 10.25 \\ 2.5 \end{pmatrix}$$

У разі виключення невідомої x_2 з останнього рівняння виберемо найбільший за модулем елемент другого стовпця, який розташований у третьому рядку. Переставимо другий і третій рядки й отримаємо таку систему:

$$\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{Ax} = \mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{b}$$

```
In[]:= P23 = {{1, 0, 0}, {0, 0, 1}, {0, 1, 0}};
       A3 = P23 . A2; b3 = P23 . b2;
       Print[MatrixForm[A3], MatrixForm[X], "=", MatrixForm[b3]]
```

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.25 & -0.5 \\ 0 & -4.5 & 5.0 \\ 0 & 2.75 & 0.5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.75 \\ 2.5 \\ 10.25 \end{pmatrix}$$

Виключимо невідому x_2 із останнього рівняння. Для цього утворимо елементарну нижню матрицю $\mathbf{L}_2$ і перетворимо систему з її допомогою. Вона набуде такого вигляду:

$$\mathbf{L}_2\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{Ax} = \mathbf{L}_2\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{b}$$

```
In[]:= L2 = {{1, 0, 0}, {0, -1/4.5, 0}, {0, 2.75/4.5, 1}};
       A4 = L2 . A3; b4 = L2 . b3;
       Print[MatrixForm[A4], MatrixForm[X], "=", MatrixForm[b4]]
```

$$\begin{pmatrix} 1 & -0.25 & -0.5 \\ 0 & 1 & -1.11111 \\ 0 & 2.77556\times10^{-16} & 3.55556 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.75 \\ -0.55556 \\ 11.7778 \end{pmatrix}$$

Заключний крок прямого ходу методу Гаусса полягає в знаходженні значення невідомого x_2, що еквівалентно множенню останнього рівняння на матрицю $\mathbf{L}_3$

```
In[]:= L3 = {{1, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1/355556}};
       A5 = L3 . A4; b5 = L3 . b4;
       Print[MatrixForm[A5], MatrixForm[X], "=", MatrixForm[b5]]
```

$$\begin{pmatrix} 1. & -0.25 & -0.5 \\ 0. & 1. & -1.11111 \\ 0. & 7.80625\times10^{-17} & 0.999999 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.75 \\ -0.555556 \\ 3.3125 \end{pmatrix}$$

Отже, для розглянутого прикладу процес виключення Гаусса з вибором головного елемента записується у такий спосіб:

$$\mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{Ax} = \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{b}. \tag{2.36}$$

При цьому матриця

$$\mathbf{U} = \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{13}\mathbf{A} \tag{2.37}$$

є верхньою трикутною матрицею з одиничною головною діагоналлю.

Відмінність від звичайного методу Гаусса полягає в тому, що як співмножники в (2.37) разом із елементарними трикутними матрицями $\mathbf{L}_k$ можуть бути присутні елементарні матриці перестановок $\mathbf{P}_{ki}$.

Покажемо, що з (2.37) випливає розкладання

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU}, \tag{2.38}$$

де $\mathbf{L}$ — нижня трикутна матриця, яка має обернену матрицю, і $\mathbf{P}$ — матриця перестановок. Для цього знайдемо матрицю

$$\tilde{\mathbf{L}}_1 = \mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1\mathbf{P}_{23}.$$

На основі другої властивості елементарних матриць $\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1$ обчислюють із матриці $\mathbf{L}_1$ перестановкою другого і третього рядків:

```
In[]:= MatrixForm[P23 . L1]
```

$$\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 0 & 1 \\ -\frac{3}{4} & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Матриця $\tilde{\mathbf{L}}_1$ відповідно до третьої властивості обчислюється з $\mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1$ перестановкою другого і третього стовпців:

```
In[]:= MatrixForm[P23 . L1 . P23]]
```

$$\tilde{\mathbf{L}}_1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ -\frac{1}{2} & 1 & 0 \\ -\frac{3}{4} & 0 & 1 \end{bmatrix}, \tag{2.39}$$

тобто $\tilde{\mathbf{L}}_1$ — нижня трикутна матриця, що має обернену матрицю.

З виразу (2.39), враховуючи рівність $\mathbf{P}_{23} = \mathbf{P}_{23}^{-1}$, отримаємо

$$\tilde{\mathbf{L}}_1\mathbf{P}_{23} = \mathbf{P}_{23}\mathbf{L}_1. \tag{2.40}$$

Звідси і з (2.37) бачимо, що

$$\mathbf{U} = \mathbf{L}_3\mathbf{L}_2\tilde{\mathbf{L}}_1\mathbf{P}_{23}\mathbf{P}_{13}\mathbf{A} = \mathbf{L}^{-1}\mathbf{PA},$$

де позначено $\mathbf{P} = \mathbf{P}_{23}\mathbf{P}_{13}$, $\mathbf{L} = \tilde{\mathbf{L}}_1^{-1}\mathbf{L}_2^{-1}\mathbf{L}_3^{-1}$.

Оскільки $\mathbf{P}$ — матриця перестановок і $\mathbf{L}$ — нижня трикутна матриця, розкладання (2.38) доведено. Воно означає, що метод Гаусса з вибором головного елемента по стовпцю еквівалентний звичайному методу Гаусса, який застосовується до матриці $\mathbf{PA}$, тобто до системи, отриманої з початкової системи перестановкою деяких рівнянь. У даному прикладі матриця перестановок $\mathbf{P}$ має такий вигляд:

```
In[]:= PS = P23 . P13;
       P = MatrixForm[PS]
```

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Перетворена система рівнянь, застосування до якої звичайного методу Гаусса еквівалентно застосуванню методу Гаусса з вибором головного елемента по стовпцю, запишеться так:

```
In[]:= MatrixForm[PS . A]
       MatrixForm[X]
       MatrixForm[PS . b]
```

$$\begin{bmatrix} 4 & -1 & -2 \\ 2 & -5 & 4 \\ 3 & 2 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 1 \\ 8 \end{bmatrix}.$$

Результат, отриманий тут для окремого прикладу, справедливий і для будь-якої системи рівнянь. Взагалі метод Гаусса з вибором головного елемента по стовпцю можна записати в такому вигляді:

$$\begin{aligned} &\mathbf{L}_n \mathbf{L}_{n-1} \mathbf{P}_{n-1,J_{n-1}} \mathbf{L}_{n-2} \; \dots \; \mathbf{L}_2 \mathbf{P}_{2,J_2} \mathbf{L}_1 \mathbf{P}_{1,J_1} \mathbf{Ax} = \\ &= \mathbf{L}_n \mathbf{L}_{n-1} \mathbf{P}_{n-1,J_{n-1}} \mathbf{L}_{n-2} \; \dots \; \mathbf{L}_2 \mathbf{P}_{2,J_2} \mathbf{L}_1 \mathbf{P}_{1,J_1} \mathbf{b}, \end{aligned} \tag{2.41}$$

де $\mathbf{P}_{k,J_k}$ — елементарні матриці перестановок і $\mathbf{L}_k$ — елементарні нижні трикутні матриці.

Звідси, використовуючи співвідношення перестановок, аналогічні (2.40), можна показати, що метод Гаусса з вибором головного елемента по стовпцю еквівалентний звичайному методу Гаусса, який застосовують до системи

$$\mathbf{PAx} = \mathbf{Pb}, \tag{2.42}$$

де $\mathbf{P}$ — деяка матриця перестановок.

Отже, якщо $\det \mathbf{A} \neq 0$, то існує матриця перестановок $\mathbf{P}$ така, що матриця $\mathbf{PA}$ має відмінні від нуля кутові мінори.

І таким чином, якщо $\det \mathbf{A} \neq 0$, то існує матриця перестановок $\mathbf{P}$ така, що справедливе розкладання

$$\mathbf{PA} = \mathbf{LU}, \tag{2.43}$$

де $\mathbf{L}$ — нижня трикутна матриця з відмінними від нуля діагональними елементами і $\mathbf{U}$ — верхня трикутна матриця з одиничною головною діагоналлю.

Приклад 2.4

У пакеті Mathematica існують оператори виключення Гаусса, що реалізовані на основі LU-розкладання матриці **PA** системи рівнянь. Для того щоб скористатися ними, необхідно спочатку відкрити пакет

```
In[]:= <<LinearAlgebra`GaussianElimination`
```

Введемо матрицю системи рівнянь і обчислимо її визначник, який відмінний від нуля

```
In[]:= A = {{1, 4, -5}, {12, -1, 10}, {4, 8, -3}}; Det[A]
Out[]= -273
```

Виконаємо LU-розкладання матриці за допомогою оператора

```
In[]:= A1 = LUFactor[A]
```

Out[]= $\mathrm{Lu}\left[\left\{\left\{\left\{\frac{1}{12}, \frac{49}{100}, -\frac{273}{100}\right\}, \{12, -1, 10\}, \left\{\frac{1}{3}, \frac{25}{3}, -\frac{19}{3}\right\}, \{2, 3, 1\}\right\}\right]$

Нами отримана відповідь у вигляді списку, в який компактно підставлені матриці **L** і **U**, обчислені в результаті виключення невідомих із вибором головного елемента по стовпцю. Тепер можна отримати розв'язок системи рівнянь із матрицею **A** для будь-якої правої частини **b**:

```
In[]:= b = {1, -2, 5}; X = LUSolve[A1, b]
```

Out[]= $\left\{-\frac{22}{39}, \frac{44}{39}, \frac{23}{39}\right\}$

Компактний запис матриць **L** і **U** може бути отриманий за допомогою оператора

```
In[]:= A1[[1]]
```

Out[]= $\left[\left\{\left\{\frac{1}{12}, \frac{49}{100}, -\frac{273}{100}\right\}, \{12, -1, 10\}, \left\{\frac{1}{3}, \frac{25}{3}, -\frac{19}{3}\right\}\right\}\right]$

Вектор $\mathbf{p} = \{2, 3, 1\}$ визначає порядок рівнянь у разі виключення невідомих із вибором головного елемента по стовпцю. В даному випадку спочатку міняються місцями друге та перше рівняння. На другому кроці третє рівняння стає другим і відбувається виключення невідомої x_2. Цим перестановкам відповідає матриця **P**:

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

У відповідності з формулою (2.43) отримали розклад матриці $\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$, що з точністю до порядку рядків, який визначається вектором $\mathbf{p} = [2,\ 3,\ 1]$, дає компактний запис матриць **L** і **U**. Самі матриці можна отримати, помноживши матрицю `A1[[1]]` на матрицю перестановок

```
In[]:= lu = P . A1[[1]]
```

Out[]= $\left\{\{12, -1, 10\}, \left\{\frac{1}{3}, \frac{25}{3}, -\frac{19}{3}\right\}, \left\{\frac{1}{12}, \frac{49}{100}, -\frac{273}{100}\right\}\right\}$

На головній діагоналі матриці **LU** і над нею розташовані елементи матриці **U**, нижче головної діагоналі — елементи матриці **L**. Причому елементи на головній діагоналі матриці **L** дорівнюють одиниці. Отримаємо матриці **L** і **U**:

```
In[]:= U = lu*Table[If[i<=j, 1, 0], {i, Length[lu]}, {j, Length[lu]}]; MatrixForm[U]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 12 & -1 & 10 \\ 0 & \frac{25}{3} & -\frac{19}{3} \\ 0 & 0 & -\frac{273}{3} \end{pmatrix}$$

```
In[]:= L = lu - U + IdetityMatrix[Length[lu]]; MatrixForm[L]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \frac{1}{3} & 1 & 0 \\ \frac{1}{12} & \frac{49}{100} & 1 \end{pmatrix}$$

Для перевірки знайдемо добуток **LU**:

```
In[]:= MatrixForm[L . U]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 12 & -1 & 10 \\ 4 & 8 & -3 \\ 1 & 4 & -5 \end{pmatrix}$$

Отримана матриця ідентична матриці **PA**. Помітно, що структура матриць **L** і **U** в пакеті Mathematica відрізняється від структури цих матриць, прийнятої в (2.43). Там матриця **U** має одиничну діагональ, а в Mathematica матриця **L** має одиничну діагональ. В обох випадках вираз (2.43) справедливий. На закінчення перевіримо отриманий вище розв'язок **x**:

```
In[]:= Z = {z1, z2, z3}; Solve[A . Z == b, Z}
```

Out = $\left\{\left\{z1 \to -\frac{22}{39}, z2 \to \frac{44}{39}, z3 \to \frac{23}{39}\right\}\right\}$

2.4. Алгоритми LU-розкладання матриці без операцій матричного множення

2.4.1. Базові формули перетворення

Трикутні матриці **L** та **U**, на які розкладається матриця **A**, на однопроцесорних ЕОМ одержують не виконанням наведеної вище процедури матричних перетворень, що ґрунтуються на використанні послідовності елементарних нижніх трикутних матриць $\mathbf{L}_k$, а за допомогою прямих рекурентних формул перетворення, отриманих на основі формул множення матриць. Дійсно,

$$a_{sj} = \sum_{k=1}^{j} l_{sk} u_{kj}, \quad s > j, \tag{2.44}$$

$$a_{sj} = \sum_{k=1}^{s} l_{sk} u_{kj}, \quad s \leqslant j, \tag{2.45}$$

тому що

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{bmatrix},$$

при цьому $l_{sk} = 0$ для $k > s$ і $u_{kj} = 0$ для $k > j$.
Оскільки вибрані значення $l_{ss} = 1$, то з виразу (2.44) випливає:

$$a_{sj} = u_{sj} + \sum_{k=1}^{s-1} l_{sk} u_{kj}, \quad \text{звідки} \quad u_{sj} = a_{sj} - \sum_{k=1}^{s-1} l_{sk} u_{kj}.$$

З виразу (2.45) знаходимо:

$$a_{sj} = l_{sj} u_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} l_{sk} u_{kj}, \quad \text{звідки} \quad l_{sj} = \frac{a_{sj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{sk} u_{kj}}{u_{jj}}, \; s = j+1, \dots$$

Отже, елементи нижньої $\mathbf{L}$ і верхньої $\mathbf{U}$ матриць обчислюються за формулами:

$$\left. \begin{aligned} u_{sj} &= a_{sj} - \sum_{k=1}^{s-1} l_{sk} u_{kj}, \quad j = s, \dots, m, \\ l_{is} &= \frac{a_{is} - \sum_{k=1}^{s-1} l_{ik} u_{ks}}{u_{ss}}, \quad i = s+1, \dots, n, \end{aligned} \right\} \tag{2.46}$$
$$s = 1, 2, \dots, n,$$

де $u_{ss} \neq 0$. Нижче, в підрозділі 2.5.3, буде показано можливість застосування формул (2.46) і для випадку $u_{ss} = 0$.

Формули (2.34), (2.35) зводяться до

$$\begin{aligned} y_i &= b_i - \sum_{s=1}^{i-1} l_{is} y_s, \quad i = 1, 2, \dots, n, \\ x_i &= \frac{1}{u_{ii}} \left(y_i - \sum_{s=i+1}^{n} u_{is} x_s \right), \quad i = 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \tag{2.47}$$

Порядок віднімання попарних добутків елементів l_{sk} і u_{kj}, розташованих у рядку s і стовпці j, у разі перетворення елемента початкової матриці **A** в елемент матриці **L** або **U** показано на рис. 2.2. При цьому елемент a_{sj}, розташований на діагоналі матриці **A** або справа від неї, перетворюється у відповідний елемент матриці **U** відніманням від його початкового значення вказаних попарних добутків елементів l_{sk} і u_{kj} (рис. 2.2, *а*), а елемент a_{sj}, розташований нижче діагоналі матриці **A**, перетворюється у відповідний елемент матриці **L** відніманням від його початкового значення вказаних попарних добутків елементів l_{sk} і u_{kj} та нормування результату за значенням u_{jj} (рис. 2.2, *б*).

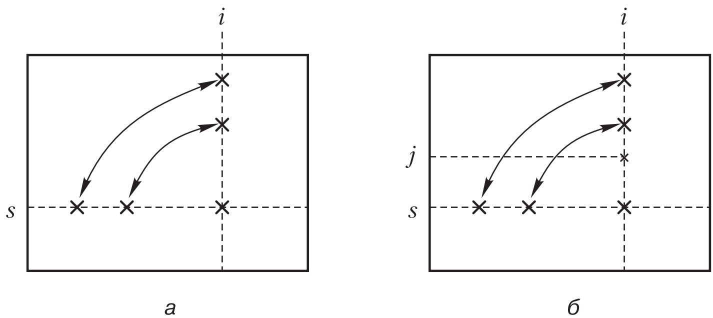


Рис. 2.2. Перетворення елементів матриці A на елементи матриць U і L

Неважко бачити, що формули (2.46) обчислення елементів матриць **L** і **U** практично збігаються з формулами (2.14) і (2.15) методу Гаусса для перерахунку значень елементів матриці **A** у разі послідовного обнулювання елементів стовпців, що лежать нижче від діагонального елемента, особливо для випадку, коли віднімання попарних добутків елементів l_{sk} і u_{kj} здійснюється для всіх елементів неперетвореної частини матриці **A** на кожному кроці, пов'язаному з перетворенням елементів поточного рядка (стовпця) матриці **A**. Тому складність LU-розкладання, що виконується на однопроцесорній ЕОМ, оцінюється також величиною

$$f_A(n) = n^3/3 + n^2 = O(n^3),$$

до якої додається складність розв'язку двох систем лінійних рівнянь із трикутними матрицями (2.47), що складає приблизно n^2 операцій множення/ділення.

Цей показник набагато менший, ніж у випадку обчислення трикутних матричних множників за формулою (2.31) на однопроцесорній ЕОМ, коли потрібне виконання n множень двох матриць, або в цілому n^4 операцій множення/ділення, якщо врахувати складність процедури множення двох матриць (1.18).

У порівнянні з методом Гаусса основною перевагою LU-розкладання, яка випливає з формул (2.47), є можливість за знайдених **L** і **U** та різних векторах правої частини **b** за результатами попереднього розкладання багатократно повторювати тільки зворотний хід розв'язання системи лінеаризованих рівнянь.

Ця перевага дозволяє також на порядок зменшити кількість операцій множення/ділення, які необхідно виконати для обчислення оберненої матриці.

Приклад 2.5

Нехай задана матриця **A** розмірності 3×3. Використовуючи формули (2.46), послідовно перетворимо елементи початкової матриці спочатку в загальному вигляді:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ l_{21} & u_{22} & u_{23} \\ l_{31} & l_{32} & u_{33} \end{bmatrix},$$

де

$$\begin{array}{lll} u_{11} = a_{11}, & u_{12} = a_{12}, & u_{13} = a_{13}, \\ l_{21} = \dfrac{a_{22}}{u_{11}}, & u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}, & u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}; \\ l_{31} = \dfrac{a_{31}}{u_{11}}; & l_{32} = \dfrac{1}{u_{22}}(a_{32} - l_{31}u_{12}); & u_{33} = a_{33} - u_{13}l_{31} - u_{23}l_{32}. \end{array}$$

Код LU-розкладання заданої матриці в пакеті Mathematica має такий вигляд:

```
In:= A = {{9, 3, 1}, {-3, 4, 5}, {8, 2, 7}}; n = Length[A];
     U = Table[0, {n},{n}];
     L = IdentityMatrix[n];
     If [A[[1, 1]] == 0, Print ["a [1, 1] =", A [[1, 1]]]; Abort[]]
     Do [{ Do [{summ = 0., Do [{summ = summ + L[[s,k]]*U[[k,j]] }, {k, 1, s-1}],
        U[[s,j]] = A[[s,j]] - summ}, {j, s, n}],
           Do [{summ = 0., Do [{summ = summ + L[[i,k]]*U[[k,s]] }, {k, 1, s-1}],
     If [Abs[U[s,s]] <= 10^(-10), {Print ["U[s,s] =", U[s,s],", S =", S], Abort []}],
        L[[i,s]] = (A[[i,s]] - summ)/U[[s,s]] }, {i, s+1, n}]}, {s, 1, n}];
     MatrixForm[L]
     MatrixForm[U]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0.333333 & 1 & 0 \\ 0.888889 & -0.133333 & 1 \end{pmatrix}$$

```
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 9. & 3. & 1.0 \\ 0 & 5. & 5.33333 \\ 0 & 0 & 6.82222 \end{pmatrix}$$

2.4.2. Метод Дуллітла і Краута

Є декілька методик організації процедури LU-розкладання елементів матриці **A**. У більшості випадків початкова матриця розгортається у змінних напрямках *«рядок-стовпець»*:

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ l_{21} & l_{31} & l_{41} & \dots & l_{n1} \\ u_{22} & u_{23} & u_{24} & \dots & u_{2n} \\ l_{32} & l_{32} & l_{42} & \dots & l_{n2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Тому формули (2.46) використовують у такий спосіб: спочатку перший рядок початкової матриці **A** переноситься без змін як перший рядок до матриці **U**, а елементи першого стовпця матриці **A**, нормовані за значенням діагонального елемента, переносяться в перший стовпець матриці **L**. Потім елементи другого рядка a_{2s} початкової матриці перетворюються в елементи матриці **U** (відніманням отриманих раніше попарних добутків елементів l_{21} і u_{1s}) і елементи другого стовпця a_{s2} — в елементи другого стовпця матриці **L** (відніманням отриманих раніше попарних добутків елементів l_{s1} і u_{12} і ділення результату на u_{22}) і т. д.

Проте відомі й інші підходи. Так, у разі використання *методу Дуллітла* матриця розгортається по рядках у такому порядку:

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ l_{21} & & & & \\ u_{22} & u_{23} & u_{24} & \dots & u_{2n} \\ l_{31} & l_{32} & & & \\ u_{33} & u_{34} & u_{35} & \dots & u_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Спочатку перший рядок матриці **A** переноситься як перший рядок до матриці **U**, потім елементи a_{sj} наступних рядків, які стоять до діагональної позиції, перетворюються в елементи матриці **L**, а елементи, що займають діагональні позиції та розташовані праворуч від діагоналі, перетворюються в елементи матриці **U** згідно з формулами (2.46).

У разі застосування *методу Краута* матриця розгортається по стовпцях:

$$\begin{bmatrix} l_{11} & l_{21} & l_{31} & \dots & l_{n1} \\ u_{12} & u_{22} & \dots & & \\ l_{32} & l_{42} & l_{52} & \dots & l_{n2} \\ u_{13} & u_{23} & u_{33} & \dots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Спочатку елементи першого стовпця початкової матриці, нормовані за значенням діагонального елемента, переносяться в перший стовпець матриці **L**, а потім елементи a_{sj} наступних стовпців, що стоять вище за діагональну позицію і на самій діагоналі початкової матриці, перетворюються в елементи матриці **U**, а елементи, розташовані нижче від діагональної позиції, перетворюються в елементи матриці **L**. При цьому одиничні елементи вибираються не на діагоналі матриці **L** (як це було прийнято раніше), а на діагоналі матриці **U**, що призводить до зміни формул перерахунку значень елементів матриць **L** і **U**. Замість співвідношень (2.42) будуть справедливі такі вирази:

$$\left.\begin{aligned} u_{ij} &= \frac{1}{l_{ii}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}\right), \quad && i < j,\ \ i = 1, 2, \dots, n,\ \ j = 1, 2, \dots, n, \\ l_{ij} &= a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}, && i \geqslant j,\ \ i = 1, 2, \dots, n,\ \ j = 1, 2, \dots, n. \end{aligned}\right\} \qquad (2.48)$$

Раніше для однієї й тієї же самої матриці були отримані звичайний LU-розклад у прикладі 2.5 і розклад за Краутом у прикладі 2.2, які звісно, не збігаються.

Розглянуті методи (звичайне LU-перетворення, метод Дуллітла і метод Краута) еквівалентні і відрізняються організацією маршруту обчислень, що позначається за їх програмної реалізації на частоті виклику і порядку зміни підпрограм перерахунку значень елементів початкової матриці, які реалізують співвідношення (2.46) або (2.48). У звичайному LU-перетворенні кожна з таких підпрограм обробляє поперемінно всі елементи рядка або стовпця, що залишилися до даного кроку неперетвореними, а в разі застосування методів Дуллітла і Краута обидві ці підпрограми використовуються для обробки елементів кожного рядка або кожного стовпця. Залежно від конкретної структури матриці і значень її елементів час виконання обчислень може змінюватись.

2.4.3. Метод Холецького

Метод Холецького використовується для розв'язання систем лінійних рівнянь з симетричними додатними матрицями $(a_{ij} = a_{ji})$. У цих випадках приймається, що $u_{kk} = l_{kk}$, $u_{sj} = l_{js}$.

З добутку двох матриць

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \dots & a_{3n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & l_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & \dots & u_{1,n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2,n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3,n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{n,n} \end{bmatrix}$$

за правилами матричного множення знаходимо співвідношення між елементами матриць:

$$a_{11} = l_{11}u_{11} \Rightarrow l_{11} = u_{11} = \sqrt{a_{11}},$$

$$a_{i1} = l_{i1}u_{11} \Rightarrow l_{i1} = \frac{a_{i1}}{l_{11}},$$

$$a_{1i} = l_{11}u_{1i} \Rightarrow u_{1i} = \frac{a_{1i}}{l_{11}}.$$

З формули (2.46) маємо

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

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} + l_{ij}u_{jj}. \tag{2.49}$$

Тому перетворення Холецького для симетричних матриць набуває такого вигляду:

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}, \quad j = 1, 2, ..., k-1, \tag{2.50}$$

$$l_{jj} = \left(a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}^2 \right)^{1/2}, \quad j = 1, 2, ..., k. \tag{2.51}$$

Приклад 2.6

Користуючись методом Холецького, розкладемо матрицю

$$\begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 976 \end{bmatrix}$$

у добуток двох трикутних матриць.

Згідно з формулами (2.50) і (2.51) знаходимо:

$$l_{11} = \sqrt{a_{11}} = \sqrt{6} = 2,4495,$$

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{l_{11}} = \frac{15}{2,4495} = 6,1237,$$

$$l_{31} = \frac{a_{31}}{l_{11}} = \frac{55}{2,4495} = 22,4537,$$

$$l_{12} = 0,$$

$$l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} = \sqrt{55 - (6,12371)^2} = 4,1833,$$

$$l_{32} = \frac{a_{32} - l_{21} l_{31}}{l_{22}} = \frac{225 - 6,1237(22,4537)}{4,1833} = 20,9165,$$

$$l_{13} = 0, \quad l_{23} = 0,$$

$$l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2} = \sqrt{976 - (22,4537)^2 - (20,9165)^2} = 5,8595,$$

$$\mathbf{L} = \mathbf{U}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2,4495 & 0 & 0 \\ 6,1237 & 4,1833 & 0 \\ 22,4537 & 20,9165 & 5,8595 \end{bmatrix}.$$

У складі пакета `LinearAlgebra` системи Mathematica є функція розкладання за методом Холецького, виклик якої здійснюється оператором

```
In[]:= <<LinearAlgebra`Cholesky`
```

Розв'яжемо систему рівнянь методом Холецького. Введемо матрицю системи і вектор правих частин рівнянь:

```
In[]:= A = {{6, 15, 55}, {15, 55, 225}, {55, 225, 976}};
       B = {1, 4, -5};
```

Наведений нижче оператор здійснює розкладання матриці за методом Холецького

```
In[]:= U = CholeskyDecomposition[A]; MatrixForm[U]
Out//MatrixForm =
```

$$\begin{pmatrix} \sqrt{6} & 5\sqrt{\frac{3}{2}} & \frac{55}{\sqrt{6}} \\ 0 & \sqrt{\frac{35}{2}} & 5\sqrt{\frac{35}{2}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{103}{2}} \end{pmatrix}$$

Покажемо матрицю **U** з числовими значеннями її елементів:

```
In[]:= MatrixForm[N[U]]
Out//MatrixForm =
```

$$\begin{pmatrix} 2.44949 & 6.12372 & 22.4537 \\ 0 & 4.1833 & 20.9165 \\ 0 & 0 & 5.85947 \end{pmatrix}$$

Перевіримо правильність отриманого розкладу:

```
In[]:= A - Transpose[U] . U
Out[]= {{0, 0, 0}, {0, 0, 0}, {0, 0, 0}}
```

Приклад 2.7

Повторимо, користуючись співвідношеннями (2.46), розв'язання системи лінійних рівнянь з прикладу 2.2, що був виконаний раніше за допомогою послідовності елементарних матриць виключення для матричного варіанта методу Гаусса.

Початковою системою є

$$\begin{bmatrix} 9 & 3 & 1 \\ -3 & 4 & 5 \\ 8 & 2 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -4 \\ 5 \end{bmatrix}.$$

Скористаємося LU-розкладом матриці системи рівнянь, отриманим у прикладі 2.5:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0,333333 & 1 & 0 \\ 0,888889 & -0,133333 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 9 & 3 & 1 \\ 0 & 5 & 5,333333 \\ 0 & 0 & 6,822222 \end{bmatrix}.$$

У відповідності з формулами (2.47) запишемо процес розв'язування у пакеті Mathematica:

```
In[]:= L = {{1, 0, 0}, {-0.333333, 1, 0}, {0.888889, -0.133333, 1}};
       U = {{9., 3., 1.}, {0, 5., 5.333333}, {0, 0, 6.822222}};
       b = {6, -4, 5};
       n = Length[L];
In[]:= Do [{summ = 0., Do [{summ = summ + L[[i,s]]*y[s];}, {s, 1, i-1} ],
          y[i] = b[[i]] - summ}, {i, 1, n} ]
In[]:= Y = Array[y, n]
Out[]= {6., -2., -0.6}
```

```
In[]:= Do [{summ = 0., Do [{summ = summ + U[[i,s]]*x[s];}, {s, i+1, n} ],
         x[i] = (Y[[i]] - summ)/U[[i,i]]}, {i, n, 1, -1} ]
In[]:= X = Array[x, n]
Out[]= {0.778502, -0.306189, -0.0879479}
```

Для кращого розуміння процесу розв'язування наведемо його хід у наочній формі:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -0,333333 & 1 & 0 \\ 0,888889 & -0,133333 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -4 \\ 5 \end{bmatrix}.$$

Звідси випливає

$$y_1 = 6,$$
$$y_2 = -4 + 0,333333 \cdot 4 = -2,$$
$$y_3 = 5 - \ 0,888889 \cdot 6 + 0,133333 \cdot 2 = -0,6,$$

$$\begin{bmatrix} 9 & 3 & 1 \\ 0 & 5 & 5,333333 \\ 0 & 0 & 6,822222 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ -2 \\ -0,6 \end{bmatrix},$$

$$x_3 = -0,6/6,82222 = -0,087948,$$
$$x_2 = \frac{-2 - 5,33333 \cdot (-0,087948)}{5} = -0,306189,$$
$$x_1 = \frac{6 - (-0,087948) - 3 \cdot (-0,306189)}{9} = 0,778502.$$

2.4.4. Обчислення оберненої матриці на основі LU-розкладу

Знаючи розклад $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, можна обчислити обернену матрицю на основі виразу $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{L}^{-1}$. Позначимо елементи матриці $\mathbf{L}^{-1}$ через k_{ij}, а елементи матриці $\mathbf{U}^{-1}$ через m_{ij}; обчислимо їх:

$$\mathbf{L}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = [\delta_{ij}], \quad \mathbf{U}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = [\delta_{ij}], \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, \ i = j, \\ 0, \ i \neq j. \end{cases}$$

$$k_{ij} = \frac{\delta_{ij} - \sum_{k=j}^{i-1} l_{ik}k_{kj}}{l_{ii}}, \quad i = j, ..., n,$$

$$m_{ij} = \frac{\delta_{ij} - \sum_{k=i+1}^{j} u_{ik}k_{kj}}{u_{ii}}, \quad i = j, ..., 1.$$

У відповідності з формулами (2.48) визначаємо послідовно стовпці матриць $\mathbf{L}^{-1}$ і $\mathbf{U}^{-1}$. Можна показати, що ця процедура, сигнальна функція якої $f_A(n) = = 2/3\, n^3$, є однією з найефективніших процедур обчислення оберненої матриці.

Приклад 2.8

Знайдемо обернену матрицю для

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 2 \\ 4 & 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

Спочатку обчислимо матриці $\mathbf{L}$ і $\mathbf{U}$, користуючись пакетом Mathematica:

```
In[]:= << LinearAlgebra`MatrixManipulation`
In[]:= A = {{1, 2, 3}, {2, 1, 2}, {4, 1, 2}};
In[]:= {lu, p, cn} = LUDecomposition[A]
Out[]= {{{1, 2, 3}, {2, -3, -4}, {4, 7/3, -2/3}}, {1, 2, 3}, 1}
In[]:= {l, u} = LUMatrices[lu]
Out[]= {{{1, 0, 0}, {2, 1, 0}, {4, 7/3, 1}}, {{1, 2, 3}, {0, -3, -4}, {0, 0, -2/3}}}
```

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 4 & 7/3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -3 & -4 \\ 0 & 0 & -2/3 \end{bmatrix}.$$

```
In[]:= l . u    (*перевірка*)
Out[]= {{1, 2, 3}, {2, 1, 2}, {4, 1, 2}}
```

Далі визначимо обернені матриці $\mathrm{LI} = \mathbf{L}^{-1}$ і $\mathrm{UI} = \mathbf{U}^{-1}$:

```
In[]:= LI = Inverse[l]
Out[]= {{1, 0, 0}, {-2, 1, 0}, {2/3, -7/3, 1}}
In[]:= UI = Inverse[u]
Out[]= {{1, 2/3, 1/2}, {0, -1/3, 2}, {0, 0, -3/2}}
```

$$\mathbf{L}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -2 & 1 & 0 \\ 2/3 & -7/3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 2/3 & 1/2 \\ 0 & -1/3 & 2 \\ 0 & 0 & -3/2 \end{bmatrix}.$$

```
In[]:= LI . UI   (* перевірка *)
Out[]= {{1, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1}}
```

Нарешті обчислимо обернену матрицю $\mathbf{A}^{-1}$:

```
In[]:= AI = UI . LI
Out[]= {{0, -1/2, 1/2}, {2, -5, 2}, {-1, 7/2, -3/2}}
```

$$\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{L}^{-1} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & -1 & 1 \\ 4 & -10 & 4 \\ -2 & 7 & -3 \end{bmatrix}.$$

2.5. Точність розв'язку систем лінійних рівнянь

2.5.1. Аналіз похибок через число обумовленості матриці A

Нехай $\bar{\mathbf{x}}$ — обчислене значення, $(\mathbf{x}-\bar{\mathbf{x}})$ — похибка розв'язку, $\boldsymbol{\varepsilon}=\mathbf{b}-\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}}$ — нев'язка розв'язку системи рівнянь $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$. Існують системи, для яких нев'язка може бути малою, а похибка — великою. Розглянемо загальний випадок, коли матриця $\mathbf{A}$ задана точно, а вектор $\mathbf{b}$ — з деякою абсолютною похибкою $\delta\mathbf{b}$.

$$\mathbf{A}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x})=\mathbf{b}+\delta\mathbf{b},$$
$$\delta\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{b}.$$

Користуючись нормами матриці й вектора, введеними в розділі 1, запишемо:

$$\|\delta\mathbf{x}\|\leqslant\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{b}\|,\quad \|\mathbf{b}\|=\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|\leqslant\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\|.$$

Тоді можна знайти залежність відносної похибки норми вектора розв'язку від відносної похибки норми вектора правої частини $\mathbf{b}$. Перемноживши ці дві нерівності, отримуємо

$$\|\mathbf{b}\|\|\delta\mathbf{x}\|\leqslant\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{b}\|\|\mathbf{x}\|,\quad \text{звідки}\quad \frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}\leqslant\operatorname{cond}\mathbf{A}\,\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|}. \tag{2.52}$$

У формулі (2.52) $\operatorname{cond}\mathbf{A}=\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|$ — число обумовленості матриці $\mathbf{A}$, що дорівнює максимально можливому коефіцієнту підсилення відносної похибки норми правої частини системи.

Тепер припустимо, що вектор $\mathbf{b}$ заданий точно, а матриця $\mathbf{A}$ — з похибкою. Знайдемо залежність відносної похибки норми вектора розв'язку від відносної похибки норми матриці коефіцієнтів матриці:

$$\begin{gathered}(\mathbf{A}+\delta\mathbf{A})(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x})=\mathbf{b},\quad \mathbf{A}\delta\mathbf{x}+\delta\mathbf{A}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x})=0,\\ -\delta\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}),\quad \|\delta\mathbf{x}\|\leqslant\|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}\|,\\ \frac{\|\delta\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}\|}\leqslant\operatorname{cond}\mathbf{A}\,\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}.\end{gathered} \tag{2.53}$$

З урахуванням скінченності розрядної сітки комп'ютера, навіть якщо $\mathbf{A}$ і $\mathbf{b}$ відомі точно,

$$|\bar{a}_{ij}-a_{ij}|\leqslant u|a_{ij}|,\quad \max_i\sum_{j=1}^{n}|\bar{a}_{ij}-a_{ij}|\leqslant u\ \max_i\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|,$$

$$\|\delta\mathbf{A}\|_\infty=\|\bar{\mathbf{A}}-\mathbf{A}\|_\infty\leqslant u\|\mathbf{A}\|_\infty,\quad \|\delta\mathbf{b}\|_\infty=\|\bar{\mathbf{b}}-\mathbf{b}\|\leqslant u\|\mathbf{b}\|,$$

$$(\mathbf{A}+\delta\mathbf{A})(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x})=\mathbf{b}+\delta\mathbf{b}\Rightarrow\mathbf{A}\delta\mathbf{x}+\delta\mathbf{A}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x})=\delta\mathbf{b}\Rightarrow$$

$$\Rightarrow\delta\mathbf{x}=\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{b}-\mathbf{A}^{-1}\delta\mathbf{A}(\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}),$$

$$\|\delta\mathbf{x}\| \leqslant \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{b}\| + \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\delta\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}\| \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \|\delta\mathbf{x}\| \leqslant \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}\|\frac{\|\delta\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{b}\|} + \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\mathbf{A}\|\|\mathbf{x}+\delta\mathbf{x}\|\frac{\|\delta\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}, \tag{2.54}$$

$$\|\delta\mathbf{x}\| \leqslant 2u \operatorname{cond}\mathbf{A}\,\|\mathbf{x}\|,$$

де $u = (1/2)\cdot 10^{1-t}$ — відносна похибка запису мантиси в розрядній сітці (t — розрядність комп’ютера).
Відносна помилка розв’язку мала, якщо мале $\operatorname{cond}\mathbf{A}$.

Приклад 2.9

Використовуючи метод Гаусса для розв’язання системи з $\mathbf{A}$ і $\mathbf{b}$, наведеними нижче

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1,2969 & 0,8648 \\ 0,2161 & 0,1441 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0,8642 \\ 0,1440 \end{bmatrix},$$

отримаємо замість точного розв’язку $\mathbf{x} = [2, -2]^{\mathrm{T}}$ наближений

$$\bar{\mathbf{x}} = [0,9981,\ \ -0,4870]^{\mathrm{T}},$$

нев’язка якого $\boldsymbol{\varepsilon} = [0,00907829,\ \ 0,00151271]^{\mathrm{T}}$.
Переконатися в цьому можна, користуючись операторами пакета Mathematica

```
In[]:= A = {{1.2969, 0.8648},
          {0.2161, 0.1441}};
       x = {0.9981, -0.4870};
       b = {0.8642,  0.1440};
       ε = A . x - b
Out[]= {0.00907829, 0.00151271}
```

Це сталося тому, що на результат обчислення істотно впливають помилки округлювання:

$$a_{22}^{(2)} = 0,1441 - 0,8648\cdot 0,2161/1,2969 = 7,71069\cdot 10^{-9} \approx 10^{-8}.$$

Для даного прикладу потрібна точність задавання елементів матриці a_{ij} не менша 10^{-8}, тому що система є погано обумовленою. Дійсно, в розглянутому прикладі

$$\mathbf{A}^{-1} = \begin{bmatrix} 0,1441 & -0,8648 \\ -0,2161 & 1,2969 \end{bmatrix}\cdot 10^{8}; \quad \|\mathbf{A}^{-1}\| = 1,513\cdot 10^{8}; \quad \|\mathbf{A}\| = 2,1617;$$

$$\operatorname{cond}\mathbf{A} = \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\| = 2,1617\cdot 1,5130\cdot 10^{8} = 3,3\cdot 10^{8}.$$

Обумовленість матриці зручно перевіряти засобами пакета Mathematica, в якому передбачені оператори визначення норм прямої `MatrixNorm[A]` і оберненої `InverseMatrixNorm[A]` матриць:

```
In[]:= <<LinearAlgebra`MatrixManipulation`
In[]:= A = {{1.2969, 0.8648},
          {0.2161, 0.1441}};
       c1 = MatrixNorm[A]
```

```
Out[]= 2.1617

In[]:= c2 = InverseMatrixNorm[A]
Out[]= 1.513×10^8
In[]:= condA = c1*c2
Out[]= 3.27065×10^8
```

У пакеті Mathematica існує спеціальний оператор `MatrixConditionNumber[A]`, який істотно спрощує визначення обумовленості матриці:

```
In[]:= <<LinearAlgebra`MatrixManipulation`
In[]:= A = {{1.2969, 0.8648},
          {0.2161, 0.1441}};
      MatrixConditionNumber[A]
Out[]= 3.27065×10^8
```

Покажемо зв'язок числа обумовленості $\operatorname{cond}\mathbf{A}$ з власними значеннями матриці $\mathbf{A}$, для якої проведено згідно з формулою (1.8) перетворення до діагональної форми $\mathbf{A}=\mathbf{Q}_1\mathbf{D}\mathbf{Q}_2^{\mathrm{T}}$, де $\mathbf{D}$ — діагональна матриця, $\mathbf{Q}_1, \mathbf{Q}_2$ — ортогональні матриці, сформовані з власних векторів матриці. Відомо, що ортогональні матриці не змінюють модуля вектора, тобто його квадратичної норми:

$$\left\|\mathbf{Q}_2^{\mathrm{T}}x\right\|_2^2=\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{Q}_2\mathbf{Q}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{x}=\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}=\|\mathbf{x}\|_2^2,$$

тому

$$\|\mathbf{A}\|_2^2=\frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2}\frac{\left\|\mathbf{Q}_1\mathbf{D}\mathbf{Q}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{x}\right\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2}=\frac{\|\mathbf{D}\mathbf{x}\|_2^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2}=\frac{\sum_{i=1}^{n}(d_ix_i)^2}{\|\mathbf{x}\|_2^2}\leqslant\max_i d_i^2\,\frac{\sum_{i=1}^{n}x_i^2}{\|x\|_2^2}\leqslant\max d_i^2,$$

$$\|\mathbf{D}\|_2\leqslant\max_j d_j=\lambda_{\max}\text{ — максимальне власне значення.}$$

Тобто квадратична норма матриці $\mathbf{A}$ обмежена її найбільшим власним значенням:

$$\|\mathbf{A}\|_2=\|\mathbf{D}\|_2\leqslant\lambda_{\max}. \tag{2.55}$$

З огляду на те, що ортогональне перетворення оберненої матриці має вигляд $\mathbf{A}^{-1}=\mathbf{Q}_2\mathbf{D}^{-1}\mathbf{Q}_1^{\mathrm{T}}$, отримуємо

$$\left\|\mathbf{D}^{-1}\right\|_2\leqslant\max_j(d_j^{-1})=\frac{1}{\lambda_{\min}}.$$

Це дозволяє записати число обумовленості як

$$\operatorname{cond}\mathbf{A}=\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}. \tag{2.56}$$

2.5.2. Ітераційне покращення розв'язку

Під час розв'язання погано обумовлених систем рівнянь $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ виникає нев'язка $\mathbf{A}(\mathbf{x} - \overline{\mathbf{x}})$, що дорівнює

$$\varepsilon_i = b_i - \sum_{i=1}^{n} a_{ik}\overline{x}_k, \quad i = 1, 2, ..., n.$$

Для покращення розв'язку його необхідно обчислювати з подвійною точністю. Тоді можна сформувати додаткове рівняння для визначення поправки вектора розв'язку, яке буде обчислюватися ітераційно:

$$\begin{gathered}\mathbf{x}^{(s+1)} = \mathbf{x}^{(s)} + \delta\mathbf{x}^{(s)},\\ \varepsilon^{(s)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(s)},\\ \mathbf{L}(\mathbf{U}\delta\mathbf{x}^{(s)}) = \varepsilon^{(s)}.\end{gathered} \tag{2.57}$$

За умови $nu \operatorname{cond} \mathbf{A} \leqslant 0{,}1$, процес збігається і для числа обумовленості справедлива нерівність

$$\operatorname{cond} \mathbf{A} \leqslant \frac{1}{nu} \frac{\|\delta\mathbf{x}^{(1)}\|}{\|\mathbf{x}^{(2)}\|}. \tag{2.58}$$

Сигнальна функція такого уточнення згідно з виразом (2.57) за умови, що матриці $\mathbf{L}$ і $\mathbf{U}$ вже відомі, записується як $f_n(\delta\mathbf{x}) = n^2 + 2\cdot 1/2\, n^2 = 2n^2$.

Приклад 2.10

Задана система лінійних рівнянь

$$\begin{bmatrix} 0{,}20000 & 0{,}16667 & 0{,}14286 \\ 0{,}16667 & 0{,}14286 & 0{,}12500 \\ 0{,}14286 & 0{,}12500 & 0{,}11111 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1{,}50953 \\ 0{,}43453 \\ 0{,}37897 \end{bmatrix}$$

має точний розв'язок $\mathbf{x} = [1,\ 1,\ 1]^{\mathrm{T}}$ у разі використання для відображення чисел п'яти розрядів $t = 5$.
Виконуючи за допомогою пакета Mathematica LU-розкладання, знаходимо:

```
In[]:= <<LinearAlgebra`MatrixManipulation`
In[]:= A = {{0.2,     1.16667, 0.14286},
            {0.16667, 0.14286, 0.125},
            {0.14286, 0.125,   0.11111}};
       {LU, P, conditionNumber} = LUDecomposition[A]

Out[]= {{{0.2, 0.83335, 0.7143},{1.16667, -0.829384, 0.85407},
          {0.14286, 0.00594762, 0.00398542}}, {1, 2, 3}, 703.223}
     (*зменшення точності до п'яти розрядів*)
In[]:= LU = SetAccuracy [LU,5]
Out[]= {{0.2000, 0.8334, 0.7143}, {1.1667, -0.8294, 0.8541}, {0.1429, 0.0059, 0.0040}}
```

Запишемо матриці в звичайній формі, виділивши їх із компактної форми, наведеної вище. Для цього скористаємося функціями пакета Mathematica `Upper` і `Lower`.

```
In[]:= Upper[LU_?MatrixQ]:= Transpose[LU]*Table[If[i≤j,1,0],{i,Length[LU]},{j,Length[LU]}]
In[]:= Lower[LU_?MatrixQ]:= Transpose[LU] - Upper[LU] + IdentityMatrix[Length[LU]]
In[]:= U = Upper[LU]; MatrixForm[U]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 0.20000 & 1.16667 & 0.14286 \\ 0 & -0.82938 & 0.00595 \\ 0 & 0 & 0.00399 \end{pmatrix}$$

```
In[]:= L = Lower[LU]; MatrixForm[L]
Out[]//MatrixForm=
```

$$\begin{pmatrix} 1.0000 & 0.\times 10^{-5} & 0.\times 10^{-5} \\ 0.8334 & 1.0000 & 0.\times 10^{-5} \\ 0.7143 & 0.8541 & 1.0000 \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0,8334 & 1 & 0 \\ 0,7143 & 0,8541 & 1 \end{bmatrix}; \quad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0,2000 & 0,1667 & 0,1429 \\ 0 & -0,8294 & 0,0059 \\ 0 & 0 & 0,0040 \end{bmatrix}.$$

Проведемо уточнення розв'язку $\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)}$, використовуючи $t = 10$ розрядів, і поправки вектора розв'язку:

```
In[]:= b = {1.50953, 0.43453, 0.37897};
In[]:= y = SetAccuracy[LinearSolve[L, b], 5]
Out[]= {1.5095, -0.8234, 0.0040}
In[]:= x = SetAccuracy[LinearSolve[U, y], 5]
Out[]= {0.9855, 1.0001, 1.0186}
In[]:= z0 = ε(1) = b - A . x
Out[]= {0.0000707502, 0.0000703716, -0.0000140229}
In[]:= x1 = δx(1) = LinearSolve[A, z0]
Out[]= {0.0145317, -0.000147462, -0.0186445}
```

Результат виведемо на екран, використовуючи 20 розрядів

```
In[]:= x2 = x1 + x, 20
Out[]= {1.0000,1.0000,1.0000}
```

Таким чином, після першої ітерації отримаємо:

$$\boldsymbol{\varepsilon}^{(1)} = \begin{bmatrix} -0,707502 \cdot 10^{-5} \\ 0,703716 \cdot 10^{-5} \\ 0,140229 \cdot 10^{-5} \end{bmatrix}, \quad \delta\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 0,0145317 \\ -0,000147462 \\ 0,0186445 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{x}_2 = \mathbf{x} + \delta\mathbf{x}^{(1)} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Уточнення вектора розв'язку згідно з (2.57) наведено в табл. 2.2.

Таблиця 2.2. Ітераційне уточнення розв'язку

N	$x_1^{(1)}$	$x_2^{(1)}$	$x_3^{(1)}$
1	0,9855	1,0001	1,0186
2	1,0000	1,0000	1,0000

Для оцінювання числа обумовленості заданої системи лінійних рівнянь згідно з формулою (2.58) виконаємо такі оператори:

```
In[]:= g1 = VectorNorm[x2,2]
Out[]= 1.73051
In[]:= g2 = VectorNorm[x1,2]
Out[]= 0.0236392
In[]:= condA = 2*g2*10^5/(3*g1)
Out[]= 909.873
```

Таким чином, наближена оцінка числа обумовленості дорівнює

$$\operatorname{cond}\mathbf{A} = \frac{1}{3\cdot 1/2\cdot 10^{-5}}\cdot\frac{0,0236392}{1,73051}\approx 910.$$

2.5.3. Уточнення розв'язку методом діагональної модифікації

Метод діагональної модифікації, що використовується для поліпшення розв'язку, — це метод розв'язання погано обумовлених систем, які можуть утворитися у разі лінеаризації систем нелінійних рівнянь. Попередня упорядкованість системи може буди спотворена на наступному кроці лінеаризації, тому що значення діагональних елементів матриці, які визначаються похідними від нелінійних функцій, змінюються і можуть наближатися до нуля. Упорядкування рівнянь не гарантує, що той самий порядок буде збережено на новому кроці обчислень. Метод діагональної модифікації дозволяє відмовитись від багатократного переупорядкування рівнянь і полягає в корекції матриці, виконанні з її допомогою проміжних обчислень і відновленні дійсного (істинного) розв'язку за проміжними.

Якщо на j-му кроці LU-розкладання чи виключення Гаусса діагональний елемент $a_{kk}^{(j)}$ дуже малий, модифікуємо матрицю

$$\mathbf{A}'_j = \mathbf{A}_j + \mathbf{e}_k g_k \mathbf{e}_k^{\mathrm{T}},$$

де g_k — довільна константа, що вибирається з урахуванням середніх значень елементів матриці, а $\mathbf{e}_k$ — транспонований вектор розмірності n, у якого всі елементи є нулями і лише k-й елемент дорівнює одиниці. Наприклад, для матриці $\mathbf{A}_{4\times4}$, вектор $\mathbf{e}_3 = [0,\ 0,\ 1,\ 0]^{\mathrm{T}}$.

Визначимо первинну матрицю через модифіковану:

$$\mathbf{A}_j = \mathbf{A}_j^{\mathrm{T}}[\mathbf{E} - g_k(\mathbf{A}_j^{\mathrm{T}})^{-1}\mathbf{e}_k\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}].$$

Нехай $\mathbf{z} = (\mathbf{A}_j^{\mathrm{T}})^{-1}\mathbf{e}_k$, звідси

$$\mathbf{A}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{z} = \mathbf{e}_k. \tag{2.59}$$

Тоді $\mathbf{x} = \mathbf{A}_j^{-1}\mathbf{b} = [\mathbf{E} - g_k\mathbf{z}\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}]^{-1}(\mathbf{A}'_j)^{-1}\mathbf{b} = [\mathbf{E} - g_k\mathbf{z}\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}]^{-1}\mathbf{x}'$, де $\mathbf{x}' = (\mathbf{A}'_j)^{-1}\mathbf{b}$ — проміжний розв'язок системи

$$\mathbf{A}'_j\mathbf{x}' = \mathbf{b}. \tag{2.60}$$

Для обчислення оберненої матриці $[\mathbf{E} - g_k\mathbf{z}\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}]^{-1}$ скористаємося формулою Хаусхолдера, яка зв'язує прямі й обернені матриці, що відрізняються елементами рядка:

$$\mathbf{A} = \mathbf{B} + \mathbf{p}\mathbf{q}^{\mathrm{T}}, \quad \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{B}^{-1} - \frac{\mathbf{B}^{-1}\mathbf{p}\mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}}{\mathbf{E} - \mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{B}^{-1}\mathbf{p}}.$$

Використовуючи її, запишемо

$$[\mathbf{E} - g_k\mathbf{z}\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}]^{-1} = \mathbf{E} + \frac{g_k\mathbf{z}\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}}{1 - \mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}g_k\mathbf{z}} = \mathbf{E} - \frac{\mathbf{z}\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{z}_k - 1/g_k},$$

де $\mathbf{z}_k = \mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{z}$.
Тоді

$$\mathbf{x} = \left[\mathbf{E} - \frac{\mathbf{z}\mathbf{e}_k^{\mathrm{T}}}{\mathbf{z}_k - 1/g_k}\right]\mathbf{x}', \quad \mathbf{x} = \mathbf{x}' - \left[\frac{\mathbf{x}'_k}{\mathbf{z}_k - 1/g_k}\right]\mathbf{z}, \tag{2.61}$$

тобто дійсний розв'язок формується об'єднанням двох розв'язків (2.59) і (2.60) систем із модифікованою матрицею.

Приклад 2.11

Задана система лінійних рівнянь із матрицею і вектором правої частини:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 2 & 3 \\ 0 & 2 & 4 & 0 \\ 3 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix},$$

у матриці якої діагональний елемент a_{22} дорівнює нулю, тому для розв'язання системи необхідне переупорядкування рівнянь. Щоб запобігти переупорядкуванню, модифікуємо матрицю, вибираючи значення константи $g_k = a_{22} = 3$, і відобразимо це за допомогою операторів пакета Mathematica:

```
In[]:= <<LinearAlgebra`MatrixManipulation`
In[]:= A = {{2, 0, 1, 0}, {1, 0, 2, 3}, {0, 2, 4, 0}, {3, 0, 0, 2}};
In[]:= A[[2, 2]] = 3; A
    (* перевизначення елемента матриці a22 = 3 *)
Out[]= {{2, 0, 1, 0}, {1, 3, 2, 3}, {0, 2, 4, 0}, {3, 0, 0, 2}}
```

Далі скористаємося формулами (2.59), (2.60) і отримаємо два розв'язки `x1` та `z` з модифікованою матрицею і двома різними правими частинами `b` і `b1`:

```
In[]:= b = {1, 3, 2, 4};
       b1 = {0, 1, 0, 0};
       x1 = LinearSolve[A,b]
```

Out[]= $\{-\frac{4}{9}, -\frac{25}{9}, \frac{17}{9}, \frac{8}{3}\}$

```
In[]:= z = LinearSolve[A,b1]
```

Out[]= $\{\frac{2}{9}, \frac{8}{9}, -\frac{4}{9}, -\frac{1}{3}\}$

```
In[]:= g2 = x1[[2]]/(z[[2]] -1/3)
Out[]= -5
In[]:= x = x1 - g2*z
```

Out[]= $\{\frac{2}{3}, \frac{5}{3}, -\frac{1}{3}, 1\}$

Таким чином, комбінуючи два отриманих розв'язки `x1` та `z` згідно з (2.61), отримуємо розв'язок погано обумовленої системи:

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}' - 5\mathbf{z} = \begin{bmatrix} -4/9 \\ -25/9 \\ 17/9 \\ 8/3 \end{bmatrix} - 5 \cdot \begin{bmatrix} 2/9 \\ 8/9 \\ -4/9 \\ -1/3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2/3 \\ 5/3 \\ -1/3 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Пересвідчитися в достовірності отриманого результату можна за допомогою стандартного оператора пакета Mathematica, призначеного для розв'язання лінійних систем рівнянь, яке передбачає упорядкування рівнянь перед обчисленням і в процесі обчислення:

```
In[]:= A1 = {{2, 0, 1, 0}, {1, 0, 2, 3}, {0, 2, 4, 0}, {3, 0, 0, 2}};
       b = {1, 3, 2, 4};
       LinearSolve [A1,b]
```

Out[]=$\{\frac{2}{3}, \frac{5}{3}, -\frac{1}{3}, 1\}$

2.6. Розв'язання перевизначених систем лінійних рівнянь

В інженерній практиці часто постає необхідність у розв'язанні систем лінійних рівнянь (розріджених чи не розріджених)

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b},$$

де $\mathbf{A}$ — прямокутна матриця $m \times n$ $(m > n)$. Наприклад, це трапляється у разі апроксимації поліномом експериментальних даних, обсяг яких перевищує порядок вибраного полінома.

Така система має безліч розв'язків, але можна вибрати серед них такий, що мінімізує нев'язку розв'язку

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}.$$

Можна довести, що коли $\mathbf{x}$ задовольняє умову ортогональності

$$\mathbf{A}^{\mathrm{T}}(\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = 0,$$

то для будь-якого іншого розв'язку $\mathbf{y}$ виконується нерівність $\|\mathbf{b} - \mathbf{Ax}\|_2 <$ $< \|\mathbf{b} - \mathbf{Ay}\|_2$.

Це можна зробити, скориставшись оцінками квадратичної норми для нев'язок $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}} = \mathbf{b} - \mathbf{Ax}$, $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}} = \mathbf{b} - \mathbf{Ay}$, записавши

$$\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}} = (\mathbf{b} - \mathbf{Ax}) + (\mathbf{Ax} - \mathbf{Ay}) = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}} + \mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \tag{2.62}$$

З урахуванням умови $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon} = 0$ у разі піднесення рівняння (2.62) до квадрату отримаємо:

$$\begin{gathered}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}} = \boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}} + (\mathbf{x} - \mathbf{y})^{\mathrm{T}}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{y}),\\ \|\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{y}}\|_2^2 = \|\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}}\|_2^2 + \|\mathbf{A}(\mathbf{x} - \mathbf{y})\|_2^2 > \|\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{x}}\|_2^2.\end{gathered} \tag{2.63}$$

Тому початкове перевизначене рівняння зводиться до так званої нормальної форми множенням правої та лівої його частин на транспортовану матрицю коефіцієнтів цього рівняння:

$$\begin{gathered}(\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A})\mathbf{x} = \mathbf{Cx} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{b},\\ \mathbf{x} = (\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{b},\end{gathered} \tag{2.64}$$

де $\mathbf{C} = \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$, розмірності $n \times n$; $c_{ij} = a_i^{\mathrm{T}} a_j$, де a_i, a_j — рядки початкової матриці $\mathbf{A}$.

Матриця $\mathbf{C}$ неособлива, якщо стовпці матриці $\mathbf{A}$ лінійно незалежні. Обчислення добутків $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}$ і $\mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}$ потребує $1/2\,n(n+1)m + nm = 1/2\,nm(n+3)$ операцій. Саме розв'язання виконується за $3/6\,n$ операцій.

Приклад 2.12

Знайдемо нормальну форму заданого рівняння:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\\ -1 & 1 & 0\\ 0 & -1 & 1\\ -1 & 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1\\ x_2\\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1\\ 2\\ 3\\ 1\\ 2\\ 1 \end{bmatrix} \to \begin{bmatrix} 3 & -1 & -1\\ -1 & 3 & -1\\ -1 & -1 & 3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1\\ x_2\\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1\\ 1\\ 6 \end{bmatrix}.$$

Із розв'язку нормального рівняння

$$\begin{bmatrix} 3 & -1 & -1 \\ & 8/3 & -4/3 \\ & & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2/3 \\ 6 \end{bmatrix}$$

знаходимо невідомі $x_3 = 3,\ x_2 = 7/4,\ x_1 = 5/4$.

Можна показати, що нев'язка $\boldsymbol{\varepsilon} = 1/4[-1,\ \ 1,\ \ 0,\ \ 2,\ \ 3,\ \ -3]^{\mathrm{T}}$ ортогональна стовпцям $\mathbf{A}$, тобто $\boldsymbol{\varepsilon}^{\mathrm{T}}\mathbf{a}_j = 0$.

Розв'яжемо систему рівнянь із прикладу 2.12 за допомогою пакета Mathematica:

```
In[]:= A = {{1, 0, 0}, {0, 1, 0}, {0, 0, 1}, {-1, 1, 0}, {0, -1, 1}, {-1, 0, 1}};
       B = Transpose[A]
Out[]= {{1, 0, 0, -1, 0, -1}, {0, 1, 0, 1, -1, 0}, {0, 0, 1, 0, 1, 1}}

In[]:= C = B . A
Out[]= {{3, -1, -1}, {-1, 3, -1}, {-1, -1, 3}}

In[]:= d = {1, 2, 3, 1, 2, 1};
       b = B . d
Out[]= {-1, 1, 6}

In[]:= NSolve[{3x - y - z == -1, -x + 3y - z == 1, -x -y + 3z == 6}, {x, y, z}]
Out[]= {{x → 1.25, → 1.75, z → 3.}}
```

2.7. Розв'язання систем рівнянь із комплексними коефіцієнтами

Щоб запобігти необхідності зміни форми запису комплексного числа (перетворення з арифметичної форми на тригонометричну і навпаки) під час виконання операцій множення/ділення та додавання/віднімання за методом Гаусса чи за методом LU-розкладання для розв'язання системи рівнянь із комплексними коефіцієнтами

$$\mathbf{A}(i\omega)\mathbf{X}(i\omega) = \mathbf{b}(i\omega)$$

або

$$(\mathrm{Re}\,\mathbf{A} + i\,\mathrm{Im}\,\mathbf{A})(\mathrm{Re}\,\mathbf{X} + i\,\mathrm{Im}\,\mathbf{X}) = \mathrm{Re}\,\mathbf{b} + i\,\mathrm{Im}\,\mathbf{b},$$

рекомендується звести цю задачу для кожного значення $\omega_k,\ k = 1, 2, 3, \ldots$ до вже відомої задачі розв'язання лінійних систем з дійсними коефіцієнтами. Проте в цьому разі розмірність задачі збільшиться вдвічі:

$$\begin{bmatrix} \mathrm{Re}\,\mathbf{A} & -\mathrm{Im}\,\mathbf{A} \\ \mathrm{Im}\,\mathbf{A} & \mathrm{Re}\,\mathbf{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathrm{Re}\,\mathbf{X} \\ \mathrm{Im}\,\mathbf{X} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{Re}\,\mathbf{b} \\ \mathrm{Im}\,\mathbf{b} \end{bmatrix}. \tag{2.65}$$

Приклад 2.13

Розв'яжемо систему лінійних рівнянь з заданою матрицею комплексних коефіцієнтів **A** і вектором правої частини **b** методом Гаусса:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1-2i & 2+3i \\ 2+i & 3-i \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1+3i \\ 2-5i \end{bmatrix}.$$

Скористаємось виразом (2.65) і, враховуючи, що в нашому прикладі

$$\operatorname{Re}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}, \quad \operatorname{Re}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \end{bmatrix} \quad \text{і} \quad \operatorname{Im}\mathbf{A} = \begin{bmatrix} -2 & 3 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}, \quad \operatorname{Im}\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3 \\ -5 \end{bmatrix},$$

сформуємо систему лінійних рівнянь, яку належить розв'язувати:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 & -3 \\ 2 & 3 & -1 & 1 \\ -2 & 3 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \operatorname{Re}x_1 \\ \operatorname{Re}x_2 \\ \operatorname{Im}x_1 \\ \operatorname{Im}x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \\ -5 \end{bmatrix}.$$

Скористаємось оператором `NSolve` пакета Mathematica для безпосереднього розв'язання цієї системи лінійних рівнянь, змінивши для спрощення запису позначення невідомих: $\mathtt{x} = \operatorname{Re}x_1$, $\mathtt{y} = \operatorname{Re}x_2$, $\mathtt{z} = \operatorname{Im}x_1$, $\mathtt{v} = \operatorname{Im}x_2$.
Тоді вхідний запис рівнянь у форматі пакета Mathematica і результат розрахунку матиме такий вигляд:

```
In: = NSolve[{x + 2y + 2z - 3v == 1,
              2x + 3y - z + v == 2,
             -2x + 3y + z + 2v == 3,
              x - y + 2z + 3v == - 5},
              {v,x,y,z}]
Out[]= {{v → -0.466667, x → -0.8, y → 1.06667, z → -0.866667}}
```

Тобто розв'язок нашого прикладу

$$x_1 = \operatorname{Re}x_1 + i\operatorname{Im}x_1 = -0{,}8 - i0{,}866667,$$
$$x_2 = \operatorname{Re}x_2 + i\operatorname{Im}x_2 = 1{,}06667 - i0{,}466667.$$

Ту ж систему рівнянь із комплексними коефіцієнтами безпосередньо можна розв'язати за допомогою засобів пакета Mathematica, як то показано в наступному розділі.

Слід відмітити, що оператори пакета Mathematica настільки потужні, що дають змогу розв'язувати системи лінійних рівнянь із комплексними коефіцієнтами. Так, систему рівнянь із прикладу 2.13 можна розв'язати таким чином:

```
In[]:= A = {{1 - 2 I, 2 + 3 I},
           {2 + I,   3 - I}};
       b = {1 + 3 I, 2 -5 I};
       X = LinearSolve[A,b]
```

$$\mathtt{Out[]=}\ \left\{-\frac{4}{5}-\frac{13д}{15}, -\frac{16}{15}-\frac{7д}{15}\right\}$$

2.8. Засоби пакета Mathematica, призначені для розв'язання систем лінійних рівнянь

Нагадаємо, що в пакеті Mathematica передбачено декілька можливостей для розв'язання систем лінійних рівнянь. Якщо ми маємо звичайний запис рівнянь, то доцільно користуватися оператором `Solve` з форматом

```
Solve[{eqn1, eqn2, ..., eqnr}, {x1, x2, ..., xr}].
```

Наприклад,

```
In[]:= Solve [{x + 5 y == -4, 2 x + y == 1}, {x, y}]
Out[]= {{x → 1, y → -1}}
```

Якщо система лінійних рівнянь записана в матричній формі $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, то більш ефективним виявляється оператор `LinearSolve [A, b]`, в якому використовується метод ітераційного покращення розв'язку (2.57). Для попереднього прикладу маємо:

```
In[]:= A = {{1, 5}, {2, 1}};  b = {-4, 1};  v = LinearSolve [A, b]
Out[]= {1, -1}
```

У пакеті Mathematica передбачена можливість автоматизованого переходу від звичайного запису рівнянь до їх запису в матричній формі за допомогою оператора `[A,b] = LinearEquationsToMatrices[eqn, x]`. Так, для попереднього прикладу запишемо:

```
In[]:= << LinearAlgebra`MatrixManipulation`
In[]:= LinearEquationsToMatrices [{x + 5 y == -4, 2 x + y == 1}, {x, y}]
Out[]= {{{1, 5}, {2, 1}}, {-4, 1}}
```

Якщо визначник матриці системи рівнянь дорівнює нулю, тобто `Det[A]=0`, отримати розв'язок за допомогою стандартних засобів пакета Mathematica неможливо. Однак, використовуючи оператор `RowReduce[A]`, можна виявити дефект матриці, спростити її, а потім добудувати систему рівнянь. Наприклад, для матриці з двома однаковими рядками:

```
In[]:= A ={{1, 2}, {1, 2}};
       RowReduce[A]
Out[]= {{1, 2}, {0, 0}}
```

Дія операторів `Solve` і `LinearSolve` базується головним чином на реалізації методу виключення Гаусса з попереднім упорядкуванням рівнянь. Коли ж виникає необхідність розв'язання системи $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}_i$ з різними правими частинами для однієї й тієї ж самої матриці коефіцієнтів $\mathbf{A}$, то рекомендується використовувати послідовність двох інших операторів: спочатку `LUDecomposition[A]`, а потім `LUBackSubstitution[data, bi]` для кожного вектора $\mathbf{b}_i$:

```
In[]:= << LinearAlgebra`MatrixManipulation`
In[]:= A = {{1, 5}, {2, 1}};  lud = LUDecomposition[A]
Out[]= {{1, 5}, {2, -9}}, {1, 2}, 1}
In[]:= v = LUBackSubstitution[lud, b = {-4, 1}]
Out[]= {1, -1}
```

Висновки

1. Розв'язання систем лінійних рівнянь є, по суті, базовою процедурою в пакетах математичного моделювання складних об'єктів і систем, що являють собою основний інструментарій спеціалістів з інформаційних технологій. До розв'язання лінеаризованих систем рівнянь, як буде показано далі, зводяться практично всі задачі визначення динамічних і статичних характеристик складних нелінійних об'єктів і систем, при цьому обчислення лінеаризованих систем рівнянь ітераційно повторюється сотні й тисячі разів із цілеспрямованою зміною деяких параметрів (в задачах статики і динаміки) або з випадковими їх змінами (в задачах статистики). Тому питанням оптимізації базової обчислювальної процедури приділяється така велика увага.

2. Для розв'язання лінеаризованих систем рівнянь найчастіше використовується метод LU-розкладання, який дозволяє на окремих ітераціях зберегти матрицю коефіцієнтів рівнянь і замінювати лише правую частину рівнянь результатами, отриманими на попередній ітерації.

3. Під час розв'язування систем лінійних рівнянь здійснюється їх упорядкування з метою мінімізації похибки обчислень. Таке упорядкування проводиться або попередньо (у випадку лінійної системи), або ж у процесі обчислень, коли елементи матриці коефіцієнтів лінеаризованої системи, що визначаються похідними від нелінійних функцій, змінюються від ітерації до ітерації.

4. Згаданого повторного переупорядкування можна запобігти, скориставшись методом діагональної модифікації, який дозволяє провести поточний «ремонт» матриці коефіцієнтів і знайти розв'язок.

5. Верхньою межею складності алгоритмів прямих методів розв'язання лінеаризованих рівнянь є число n^3, де n — розмірність системи рівнянь. Однак для розріджених систем рівнянь, які розглядаються у наступному розділі, цей показник набагато нижчий, оскільки він пропорційний числу ненульових елементів матриці коефіцієнтів.

6. Через застосування багатопроцесорних ЕОМ існуючі оцінки ефективності окремих чисельних методів, отриманих для однопроцесорних ЕОМ, що широко розповсюджені сьогодні, потребують перегляду. Зокрема, на основі багатопроцесорних ЕОМ успішно можуть використовуватися матричні варіанти методів Гаусса і LU-розкладання, які передбачають здебільшого виконання операції множення матриць.

7. Може статися, що потужний арсенал сучасних чисельних методів буде не в змозі забезпечити необхідну точність під час розв'язування якоїсь конкретної системи лінеаризованих рівнянь через її погану обумовленість. Це, як правило, трапляється внаслідок неправильного формування математичної задачі інженером або вченим (наприклад, через надмірну ідеалізацію компонентів системи, бажання одночасно врахувати властиві їй швидкі й повільні процеси, що відрізняються на багато порядків, тощо).

Контрольні запитання та завдання

1. Знайти коефіцієнти параболи $y = ax^2 + bx + c$, яка проходить через точки (2,8), (1,3), (–2,5).

2. Розв'язати систему лінійних рівнянь із заданою матрицею коефіцієнтів $\mathbf{A}$ і вектором правої частини $\mathbf{b}$ методом Гаусса, скориставшись алгоритмом, описаним у підрозділі 2.2:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0,21 & 2,02 & -10 \\ 0,32 & 6,01 & -25 \\ 0,44 & 8,06 & 10,01 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 0,66 \\ 1,85 \\ 2,91 \end{bmatrix}.$$

   Обчислити визначник матриці $\mathbf{A}$ перемноженням ведучих елементів під час використання методу Гаусса. Повторити обчислення, використовуючи метод обрання головного елемента по стовпцю, і порівняти отримані результати. Підрахувавши нев'язку наближеного розв'язку системи, провести ітераційне її уточнення.

3. Розв'язати систему лінійних рівнянь із заданою матрицею коефіцієнтів $\mathbf{A}$ і вектором правої частини $\mathbf{b}$ методом LU-розкладання:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 & -1 \\ 2 & -5 & 1 \\ 3 & -4 & 2 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -8 \\ 12 \\ 16 \end{bmatrix}.$$

   Знайти визначник матриці $\mathbf{A}$ та обернену матрицю $\mathbf{A}^{-1}$.

4. Виконати LU-розкладання матриці $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 5 & 8 & -1 \\ -7 & 4 & 9 & -2 \\ 6 & 2 & -1 & 4 \\ 9 & 5 & 3 & -3 \end{bmatrix}$$

   і розв'язати систему рівнянь $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}_i$, використовуючи знайдений LU-розклад:

$$\mathbf{b}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 6 \\ -3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \begin{bmatrix} 6 \\ -1 \\ 9 \\ -3 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ -7 \\ 4 \\ -3 \end{bmatrix}.$$

5. Знайти точний розв'язок системи $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ із матрицею Гільберта:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \frac{1}{6} & \frac{1}{7} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Знайти наближений розв'язок тієї ж системи $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, якщо коефіцієнти матриці Гільберта подані приблизно з округленням до чотирьох знаків:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1,0000 & 0,5000 & 0,3333 & 0,2500 \\ 0,5000 & 0,3333 & 0,2500 & 0,2000 \\ 0,3333 & 0,2500 & 0,2000 & 0,1667 \\ 0,2500 & 0,2000 & 0,1667 & 0,1429 \end{bmatrix}.$$

6. Розв'язати систему лінійних рівнянь

$$\begin{bmatrix} 3 & -0,1 & -0,2 \\ 0,1 & 7 & -0,3 \\ 0,3 & -0,2 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 20 \\ 50 \\ 15 \end{bmatrix}$$

методом LU-розкладання без матричних операцій (за алгоритмом, описаним у підрозділі 2.5.2)

7. Для системи лінійних рівнянь

$$\begin{bmatrix} 3 & -0,1 & -0,2 \\ 0,1 & 7 & -0,3 \\ 0,3 & -0,2 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 20 \\ 50 \\ 15 \end{bmatrix}$$

знайти обернену матрицю і число обумовленості, користуючись алгоритмом, описаним у підрозділі 2.4.5.

8. Довести можливість застосування методу Холецького до симетричної матриці

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 6 & 15 & 55 \\ 15 & 55 & 225 \\ 55 & 225 & 979 \end{bmatrix}$$

і виконати LU-розкладання матриці.

9. Розв'язати без переупорядкування лінійну систему

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 3 \\ 1 & 1 & 5 \\ -2 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ 0 \end{bmatrix},$$

скориставшись методом діагональної модифікації під час вибору додаткової сталої $g_{11} = 1$, довести, що проміжні розв'язки $[\mathbf{x}_1]^\mathrm{T} = [-1/6, -1/3, 1/2]$ і $[\mathbf{z}]^\mathrm{T} = [5/6, 5/3, -1/2]$, а шуканий — $[\mathbf{x}]^\mathrm{T} = [-1, -2, 1]$.

10. Розв'язати лінійну систему рівнянь із точністю до трьох значущих розрядів:

$$\begin{bmatrix} 10^{-5} & 10^{-5} & 1 \\ 10^{-5} & -10^{-5} & 1 \\ 1 & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \cdot 10^{-5} \\ -2 \cdot 10^{-5} \\ 1 \end{bmatrix}$$

а) без переупорядкування;

б) з повним переупорядкуванням;

в) з повним переупорядкуванням після зміни масштабу $x_3^1 = 10^5 x_3$.

11. Розв'язати методом LU-розкладання систему лінійних алгебраїчних рівнянь

$$\begin{bmatrix} 10 & 7 & 8 & 7 \\ 7 & 5 & 6 & 5 \\ 8 & 6 & 10 & 9 \\ 7 & 5 & 9 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \\ 3 \\ 1 \end{bmatrix}$$

й знайти число обумовленості $\operatorname{cond} \mathbf{A}$, а також похибку розв'язку $\|\delta\mathbf{x}\| / \|\mathbf{x}\|$, якщо $\|\Delta\mathbf{b}\| \leqslant 0,01$.

12. Розв'язати методом LU-розкладання лінійну систему рівнянь із матрицею Ван-дер-Монда четвертого порядку:

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 4 & 9 & 16 \\ 1 & 8 & 27 & 64 \\ 1 & 16 & 81 & 256 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 10 \\ 44 \\ 190 \end{bmatrix}$$

і знайти визначник цієї матриці.