

IV. UKŁADY RÓWNAŃ LINIOWYCH

4.1. Wprowadzenie

Układ równań liniowych

$$Ax = b,$$

gdzie A oznacza daną macierz o wymiarze $n \times n$, a b – dany n -elementowy wektor, może być rozwiązany w skończonej liczbie kroków za pomocą tzw. *metod dokładnych* lub w sposób iteracyjny. Oczywiście w obliczeniach w arytmetyce zmiennopozycyjnej metody dokładne wyznaczają rozwiązanie z dokładnością do błędów zaokrągleń. W metodach iteracyjnych wyznacza się ciąg wektorów $x^{(1)}, x^{(2)}, \dots$ zbieżny do rozwiązania, ale z uwagi na skończony czas obliczeń przyjmuje się pewien wektor $x^{(k)}$ jako rozwiązanie przybliżone. W tym przypadku występuje zatem dodatkowo błąd przybliżenia.

W kolejnych punktach poznamy trzy metody dokładne oraz najczęściej stosowane metody iteracyjne.

4.2. Eliminacja Gaussa

W metodzie eliminacji Gaussa układ równań

$$Ax = b \tag{4.1}$$

przekształca się przez odpowiednie przestawienia i kombinacje liniowe równań tego układu do układu postaci

$$Rx = c, \quad \text{gdzie } R = \begin{bmatrix} r_{11} & \dots & r_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & r_{nn} \end{bmatrix} \tag{4.2}$$

(macierz R jest macierzą trójkątną górną), który ma to samo rozwiązanie, co układ (4.1). Jeśli $r_{ii} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), to rozwiązaniem układu (4.2) jest

$$x_i = \frac{c_i - \sum_{k=i+1}^n r_{ik} x_k}{r_{ii}}, \quad i = n, n-1, \dots, 1.$$

Problem sprowadza się zatem do takiego przekształcenia macierzy A , by otrzymać macierz, w której wszystkie elementy pod główną przekątną były równe 0. Operację tę wykonuje się w $n - 1$ krokach.

Niech

$$(A, b) = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \dots & a_{nn} & b_n \end{bmatrix}.$$

Przy założeniu, że istnieje chociaż jeden element $a_{i1} \neq 0$ ($i = 1, 2, \dots, n$), pierwszy krok metody eliminacji Gaussa prowadzi do macierzy

$$(A', b') = \begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \dots & a'_{1n} & b'_1 \\ 0 & a'_{22} & \dots & a'_{2n} & b'_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & a'_{n2} & \dots & a'_{nn} & b'_n \end{bmatrix}.$$

Macierz tę otrzymuje się przez odjęcie od pozostałych równań odpowiednich wielokrotności pierwszego równania. Pierwszy krok algorytmu można opisać następująco:

- określamy element $a_{r1} \neq 0$ i przechodzimy do punktu b); jeśli nie istnieje taka liczba r ($r = 1, 2, \dots, n$), to macierz A jest osobliwa i stop,
- przestawiamy r -ty i pierwszy wiersz macierzy (A, b) otrzymując w wyniku macierz $(\bar{A}, \bar{b})$,
- odejmujemy od i -tego wiersza macierzy $(\bar{A}, \bar{b})$, $i = 2, 3, \dots, n$, l_{i1} -krotności

$$l_{i1} = \frac{\bar{a}_{i1}}{\bar{a}_{11}}$$

wiersza pierwszego i w wyniku otrzymujemy szukaną macierz (A', b') . Mamy przy tym

$$a'_{ij} = \bar{a}_{ij} - l_{i1}\bar{a}_{1j}, \quad b'_i = \bar{b}_i - l_{i1}\bar{b}_1, \quad i = 2, 3, \dots, n; \quad j = 2, 3, \dots, n.$$

Element $a_{r1} = \bar{a}_{11}$, określony w punkcie a), nazywamy *elementem podstawowym*. Teoretycznie za element podstawowy można wybrać każdy element $a_{r1} \neq 0$. Z uwagi jednak na poprawność rozwiązania (zmniejszenie wpływu błędów zaokrągleń) wybiera się

$$|a_{r1}| = \max_{i=1,2,\dots,n} |a_{i1}|.$$

Tego rodzaju wybór nazywamy *wyborem częściowym* lub *wyborem w kolumnie*.

Jeszcze lepszą poprawność algorytmu otrzymujemy, jeżeli dokonamy *pełnego wyboru* elementu podstawowego. W wariantcie tym punkty a) i b) należy zastąpić przez

- określamy liczby r i s , takie że

$$|a_{rs}| = \max_{i,j=1,2,\dots,n} |a_{ij}|$$

i przechodzimy do punktu b'), gdy $a_{rs} \neq 0$; jeśli nie istnieją takie liczby r i s , to macierz A jest osobliwa i stop,

- przestawiamy wiersze r -ty i pierwszy oraz kolumnę s -tą i pierwszą macierzy (A, b) otrzymując w wyniku macierz $(\bar{A}, \bar{b})$.

Po pierwszym kroku eliminacji otrzymujemy macierz

$$(A', b') = \left[\begin{array}{ccc|ccc} a'_{11} & & & a'^T & & b'_1 \\ - & + & - & + & - & \\ 0 & & & \tilde{A} & & \tilde{b} \end{array} \right],$$

gdzie $\tilde{A}$ oznacza macierz stopnia $n - 1$. Następny krok polega na wykonaniu takiej samej eliminacji dla macierzy $(\tilde{A}, \tilde{b})$ itd. Otrzymujemy w ten sposób ciąg macierzy

$$(A, b) = (A^{(0)}, b^{(0)}) \rightarrow (A^{(1)}, b^{(1)}) \rightarrow \dots \rightarrow (A^{(n-1)}, b^{(n-1)}) = (R, c).$$

Macierz $(A^{(j)}, b^{(j)})$ ma przy tym postać

$$(A^{(j)}, b^{(j)}) = \left[\begin{array}{cccc|cccc|c} * & \dots & * & * & * & \dots & * & * & * \\ 0 & \ddots & & * & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & * & * & \dots & * & * & * \\ - & - & - & - & + & - & - & - & + & - \\ 0 & \dots & \dots & 0 & * & \dots & * & * & * \\ \vdots & & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & * & \dots & * & * & * \end{array} \right] = \left[\begin{array}{ccc|ccc|c} A_{11}^{(j)} & & & A_{12}^{(j)} & & & b_1^{(j)} \\ - & + & - & + & - & & \\ 0 & & & A_{22}^{(j)} & & & b_2^{(j)} \end{array} \right],$$

gdzie $A_{11}^{(j)}$ oznacza macierz trójkątną górną stopnia j .

Dla metody eliminacji Gaussa zachodzi zależność

$$(R, c) = G_{n-1} P_{n-1} G_{n-2} P_{n-2} \dots G_1 P_1 (A, b),$$

gdzie P_j oznacza macierz permutacji ($j = 1, 2, \dots, n - 1$), a G_j – nieosobliwą macierz Frobeniusa¹ postaci

$$G_j = \left[\begin{array}{cccc} 1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & 1 & \\ & & -l_{j+1,j} & 1 \\ & & \vdots & \ddots \\ 0 & & -l_{n,j} & 0 & 1 \end{array} \right].$$

W j -tym kroku eliminacji Gaussa anulowane są elementy j -tej kolumny leżące poniżej przekątnej. Przy realizacji algorytmu na komputerze powstałe w ten sposób wolne miejsca wykorzystuje się do zapamiętania istotnych elementów l_{ij} ($i \geq j + 1$) macierzy G_j , tzn. korzystamy z macierzy postaci

¹ Macierz Frobeniusa to macierz, która różni się od macierzy jednostkowej co najwyżej jedną kolumną.

$$T^{(j)} = (A^{(j)}, b^{(j)}) = \left[\begin{array}{cccc|cccc} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1j} & r_{1,j+1} & \dots & r_{1n} & c_1 \\ \lambda_{21} & r_{22} & \dots & r_{2j} & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \ddots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & r_{jj} & r_{j,j+1} & \dots & r_{jn} & c_j \\ \vdots & \vdots & & - & - & - & - & - \\ \vdots & \vdots & & \lambda_{j+1,j} & a_{j+1,j+1}^{(j)} & \dots & a_{j+1,n}^{(j)} & b_{j+1}^{(j)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \lambda_{n1} & \lambda_{n2} & \dots & \lambda_{nj} & a_{n,j+1}^{(j)} & \dots & a_{nn}^{(j)} & b_n^{(j)} \end{array} \right].$$

W powyższej macierzy elementy podprzekątniowe $\lambda_{k+1,k}, \lambda_{k+2,k}, \dots, \lambda_{nk}$ w k -tej kolumnie są pewną kombinacją istotnych elementów $l_{k+1,k}, l_{k+2,k}, \dots, l_{nk}$ macierzy G_k . Oznaczając przez t_{ik} elementy macierzy $T^{(j-1)}$, a przez t'_{ik} elementy macierzy $T^{(j)}$ ($1 \leq i \leq n, 1 \leq k \leq n+1$), przejście $T^{(j-1)} \rightarrow T^{(j)}$ ($j = 1, 2, \dots, n-1$) możemy opisać następująco:

a) wybieramy element podstawowy w kolumnie, tj. określamy r , takie że

$$|t_{rj}| = \max_{i \geq j} |t_{ij}|;$$

jeżeli $t_{rj} = 0$, to macierz A jest osobliwa i stop, a w przeciwnym przypadku przechodzimy do punktu b),

b) przestawiamy wiersze r -ty i j -ty macierzy $T^{(j-1)}$ i w wyniku otrzymujemy macierz $\bar{T}$ o elementach $\bar{t}_{ik}$,

c) podstawiamy

$$t'_{ij} = l'_{ij} = \frac{\bar{t}_{ij}}{\bar{t}_{jj}} \quad \text{dla } i = j+1, j+2, \dots, n,$$

$$t'_{ik} = \bar{t}_{ik} - l'_{ij} \bar{t}_{jk} \quad \text{dla } i = j+1, j+2, \dots, n, \quad k = j+1, j+2, \dots, n+1,$$

$$t'_{ik} = \bar{t}_{ik} \quad \text{w przeciwnym przypadku.}$$

Zauważmy, że elementy $l_{j+1,j}, l_{j+2,j}, \dots, l_{nj}$ macierzy G_j są zapamiętywane w punkcie c) w ich naturalnym porządku jako elementy $t'_{j+1,j}, t'_{j+2,j}, \dots, t'_{nj}$. Kolejność ta może się jednak zmienić w następnych krokach eliminacji, gdyż w punkcie b) są przestawiane wiersze całej macierzy $T^{(k)}$ ($k \geq j$).

W wyniku powyższej eliminacji otrzymamy macierz $T^{(n-1)}$ o elementach t_{ik} , taką że $T^{(n-1)} = LR$, gdzie

$$L = \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ t_{21} & \ddots & & \\ \vdots & & \ddots & \\ t_{n1} & \dots & t_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix}, \quad R = \begin{bmatrix} t_{11} & \dots & t_{1n} \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & t_{nn} \end{bmatrix},$$

$$LR = PA, \quad \text{gdzie } P = P_{n-1} P_{n-2} \dots P_1. \quad (4.3)$$

Jeśli dla macierzy A znamy rozkład (4.3), to natychmiast można rozwiązać układ równań

z dowolną prawą stroną b . Mamy bowiem

$$PAx = LRx = Pb,$$

a więc możemy znaleźć wektor x rozwiązując dwa układy równań z macierzami trójkątnymi:

$$Lu = Pb, \quad Rx = u \quad (r_{ii} \neq 0).$$

Algorytm Gaussa pokazuje, że każda nieosobliwa macierz kwadratowa ma rozkład trójkątny postaci (4.3), ale nie każda macierz ma rozkład postaci $A = LR$. Przykładem może być macierz

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

4.3. Metoda Choleskiego

Metoda ta dotyczy rozkładu macierzy A , gdy jest ona macierzą dodatnio określoną.

Definicja 4.1. Macierz (zespoloną) A stopnia n nazywamy *dodatnio określoną*, gdy

- a) jest macierzą hermitowską, tj. $A = A^H$ ²,
- b) $x^H Ax > 0$ dla wszystkich wektorów $x \in \mathbf{C}^n$, $x \neq 0$.

Można udowodnić

Twierdzenie 4.1. Dla dowolnej macierzy A dodatnio określonej istnieje macierz A^{-1} , która też jest dodatnio określona. Wszystkie podmacierze główne³ macierzy dodatnio określonej są dodatnio określone, a wszystkie minory główne⁴ macierzy dodatnio określonej są dodatnie.

Dowód tego twierdzenia znajduje się m. in. w książce [2].

Udowodnimy

Twierdzenie 4.2. Dla każdej macierzy dodatnio określonej stopnia n istnieje dokładnie jedna macierz trójkątna dolna L stopnia n ($l_{ik} = 0$ dla $k > i$, $l_{ii} > 0$, $i = 1, 2, \dots, n$), taka że $A = LL^H$. Jeżeli A jest macierzą rzeczywistą, to również macierz L jest rzeczywista.

Dowód. W dowodzie zastosujemy zasadę indukcji matematycznej. Dla $n = 1$ macierz A składa się z jednego elementu – oznaczmy go przez α . Ponieważ macierz A jest dodatnio określona, więc $\alpha > 0$ i mamy

² $A^H = \overline{A}^T$.

³ Podmacierzą główną macierzy kwadratowej nazywamy macierz powstałą przez skreślenie wierszy i kolumn o tych samych wskaźnikach.

⁴ Minorem głównym macierzy kwadratowej nazywamy wyznacznik macierzy powstałej z danej macierzy przez skreślenie wierszy i kolumn o tych samych wskaźnikach.