$$\alpha = l_{11}\bar{l}_{11}, \text{ gdzie } l_{11} = +\sqrt{\alpha}.$$

Załóżmy, że twierdzenie jest prawdziwe dla macierzy dodatnio określonej stopnia $n - 1$. Macierz A dodatnio określoną stopnia n można zapisać w postaci

$$A = \begin{bmatrix} A_{n-1} & b \\ b^H & a_{nn} \end{bmatrix},$$

gdzie A_{n-1} oznacza macierz dodatnio określoną stopnia $n - 1$, a $b \in \mathbf{C}^{n-1}$. Z założenia indukcyjnego istnieje dokładnie jedna macierz L_{n-1} stopnia $n - 1$, taka że

$$A_{n-1} = L_{n-1}L_{n-1}^H, \text{ gdzie } l_{ik} = 0 \text{ dla } k > i \text{ oraz } l_{ii} > 0.$$

Szukaną macierz L przedstawiamy w postaci

$$L = \begin{bmatrix} L_{n-1} & 0 \\ c^H & \alpha \end{bmatrix}$$

i spróbujmy określić $c \in \mathbf{C}^{n-1}$ i $\alpha > 0$ tak, aby

$$\begin{bmatrix} L_{n-1} & 0 \\ c^H & \alpha \end{bmatrix}\begin{bmatrix} L_{n-1}^H & c \\ 0 & \alpha \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_{n-1} & b \\ b^H & a_{nn} \end{bmatrix} = A. \tag{4.4}$$

Aby zachodziła równość (4.4) muszą być spełnione warunki

$$L_{n-1}c = b,$$
$$c^H c + \alpha^2 = a_{nn}, \text{ przy czym } \alpha > 0.$$

Z pierwszego równania mamy

$$c = L_{n-1}^{-1}b,$$

gdyż macierz L_{n-1} jest macierzą trójkątną z dodatnimi elementami na głównej przekątnej, a zatem jest macierzą nieosobliwą, tj. $\det(L_{n-1}) > 0$).

Załóżmy teraz, że $c^H c \geq a_{nn}$, tj. że $\alpha^2 \leq 0$. Z zależności (4.4) wynika jednak, że $\alpha^2 > 0$, bo

$$\det A = \det(LL^H) = |\det L|^2 = |\det L_{n-1}|^2 \alpha^2$$

(wymiar macierzy trójkątnej jest równy liczbie elementów na głównej przekątnej). Z twierdzenia 4.1 wiemy, że $\det A > 0$, a z założenia indukcyjnego mamy $\det L_{n-1} > 0$. Zatem dla zależności (4.4) istnieje dokładnie jedna liczba $\alpha > 0$, dla której $LL^H = A$, a mianowicie

$$\alpha = +\sqrt{a_{nn} - c^H c}.$$ ■

Elementy macierzy L w rozkładzie $A = LL^H$ wyznacza się rekurencyjnie. Jeśli elementy l_{ij} dla $j \leq k - 1$ są już znane, to z warunku $A = LL^H$ dla elementów l_{kk} i l_{ik} $(i \geq k + 1)$ otrzymujemy zależności

$$a_{kk} = |l_{k1}|^2 + |l_{k2}|^2 + \ldots + |l_{kk}|^2, \quad l_{kk} > 0,$$
$$a_{ik} = l_{i1}\bar{l}_{k1} + l_{i2}\bar{l}_{k2} + \ldots + l_{ik}\bar{l}_{kk},$$

a stąd

$$
\begin{aligned}
l_{kk} &= \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} \left| l_{kj} \right|^2}, \quad k = 1, 2, \dots, n, \\
l_{ik} &= \frac{a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} \bar{l}_{kj}}{\bar{l}_{kk}}, \quad i = k+1, k+2, \dots, n.
\end{aligned}
\tag{4.5}
$$

Po wykonaniu rozkładu $A = LL^H$, w celu rozwiązania układu równań liniowych $Ax = b$ wystarczy rozwiązać dwa układy równań z macierzami trójkątnymi:

$$Ly = b$$

i

$$L^H x = y.$$

Macierz pierwszego układu jest macierzą trójkątną dolną, a drugiego – trójkątną górną. Oczywiście w przypadku rzeczywistym $L^H = L^T$.

Dla macierzy rzeczywistych dodatnio określonych zastosowanie metody Choleskiego do rozwiązania układu $n > 4$ równań liniowych wymaga wykonania mniejszej liczby działań niż zastosowanie metody eliminacji Gaussa. Aby to udowodnić, rozważmy łączną liczbę działań w obu metodach.

Jak pamiętamy, metoda eliminacji Gaussa polega na przekształceniu danego układu równań liniowych $Ax = b$ do równoważnego mu układu $Rx = c$, gdzie macierz R jest macierzą trójkątną górną. Rozwiązaniem ostatniego układu jest

$$x_i = \frac{c_i - \sum_{k=i+1}^{n} r_{ik} x_k}{r_{kk}}, \tag{4.6}$$

gdzie $i = n, n-1, \dots, 1$. Liczby poszczególnych działań do wyznaczenia elementów x_i z tego wzoru podano w poniższej tabelce.

działanie	*liczba działań*
dodawanie	$(n-2)(n-1)/2$
odejmowanie	$n-1$
mnożenie	$(n-2)n/2$
dzielenie	n

Łatwo sprawdzić, że łączna liczba działań do wyznaczenia wszystkich elementów x_i z wzoru (4.6) wynosi $R_1 = n^2$. W k-tym kroku eliminacji Gaussa obliczamy wielkości:

$$l_{ik} = \frac{\bar{a}_{ik}}{\bar{a}_{kk}}, \quad \text{dla } i = k+1, k+2, \dots, n,$$

$$a'_{ij} = \bar{a}_{ij} - l_{ik}\bar{a}_{kj}, \quad \text{dla } i = k+1, k+2, \dots, n \text{ oraz } j = k+1, k+2, \dots, n,$$
$$b'_i = \bar{b}_i - l_{ik}\bar{b}_k, \quad \text{dla } i = k+1, k+2, \dots, n.$$

Wykonujemy przy tym następujące liczby działań:

działanie	*liczba działań*
dodawanie	0
odejmowanie	$(n-k)^2 + n - k$
mnożenie	$(n-k)^2 + n - k$
dzielenie	$n - k$

Oznacza to, że w k-tym kroku łączna liczba działań wynosi $R_{2k} = 2(n-k)^2 + 3(n-k)$. Ponieważ kroków jest $n - 1$ (bo $k = 1, 2, \dots, n-1$), więc eliminacja wymaga

$$\begin{aligned} R_2 &= \sum_{k=1}^{n-1} R_{2k} = \sum_{k=1}^{n-1}[2(n-k)^2 + 3(n-k)] = \sum_{k=1}^{n-1}(2n^2 - 4nk + 2k^2 + 3n - 3k) \\ &= (2n^2+3n)\sum_{k=1}^{n-1} 1 - (4n+3)\sum_{k=1}^{n-1} k + 2\sum_{k=1}^{n-1} k^2 \\ &= (2n^2+3n)(n-1) - (4n+3)\frac{(n-1)n}{2} + 2\frac{(n-1)n(2n-1)}{6} \\ &= \frac{n(n-1)(4n+7)}{6} \end{aligned}$$

działań. Zatem do rozwiązania układu n równań liniowych metodą eliminacji Gaussa trzeba łącznie wykonać

$$R = R_1 + R_2 = \frac{n(4n^2+9n-7)}{6} \tag{4.7}$$

działań arytmetycznych.

W metodzie Choleskiego rozwiązujemy dwa układy równań liniowych z macierzami trójkątnymi, a łączna liczba działań do ich rozwiązania wynosi $S_1 = 2n^2$. Rozkład rzeczywistej macierzy A na iloczyn LL^T wykonujemy na podstawie wzorów (4.5) (liczby sprzężone zastępujemy odpowiednimi liczbami rzeczywistymi). Z wzorów tych wynika, że dla poszczególnych wartości k mamy:

- $k = 1$

działanie	*liczba działań*
dodawanie	0
odejmowanie	0
mnożenie	0
dzielenie	$n - 1$
pierwiastkowanie	1

- $k = 2$

działanie	*liczba działań*
dodawanie	0
odejmowanie	$n - 1$
mnożenie	$n - 1$
dzielenie	$n - 2$
pierwiastkowanie	1

- $k = 3, 4, \ldots, n$

działanie	*liczba działań*
dodawanie	$(k - 2)(n - k + 1)$
odejmowanie	$n - \mathrm{k} + 1$
mnożenie	$(k - 1)(n - k + 1)$
dzielenie	$n - k$
pierwiastkowanie	1

W poszczególnych przypadkach łączne liczby działań wynoszą odpowiednio:

$$S_{21} = n, \quad S_{22} = 3n - 3,$$
$$S_{2k} = (2k - 1)(n - k + 1), \quad \text{dla } k = 3, 4, \ldots, n.$$

Zatem sam rozkład Choleskiego wymaga

$$S_2 = S_{21} + S_{22} + \sum_{k=3}^{n} S_{2k} = n + 3n - 3 + \sum_{k=3}^{n} (2k - 1)(n - k + 1) = 4n - 3 + \frac{2n^3 + 3n^2 - 23n + 18}{6}$$

działań. Uwzględniając liczbę działań potrzebną do rozwiązania dwu układów równań liniowych z macierzami trójkątnymi otrzymujemy

$$S = S_1 + S_2 = \frac{2n^3 + 15n^2 + n}{6}. \tag{4.8}$$

Aby odpowiedzieć na pytanie dla jakich wartości n liczba działań w metodzie Choleskiego jest mniejsza od liczby działań w metodzie eliminacji Gaussa, wystarczy rozwiązać nierówność

$$S < R.$$

Zgodnie z zależnościami (4.7) i (4.8) sprowadza się to do rozwiania nierówności

$$2n^3 + 15n^2 + n < 4n^3 + 9n^2 - 7n,$$

czyli

$$2n^3 - 6n^2 - 8n > 0,$$

co można zapisać w postaci

$$n(n+1)(n-4) > 0.$$

Ponieważ liczba równań n musi być większa od 0, więc z powyższej nierówności wynika, że rozwiązaniem zadania jest $n > 4$.

4.4. Metoda Crouta

Metoda Crouta dotyczy rozwiązania układu równań liniowych

$$Tx = d, \tag{4.9}$$

z macierzą trójdiagonalną

$$T = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_3 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & c_{n-2} & a_{n-2} & b_{n-2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & c_n & a_n \end{bmatrix}$$

oraz $x, d \in \mathbf{R}^n$.

Jeśli macierz T jest diagonalnie dominująca, czyli

$$|a_1| \geq |b_1|, \quad |a_n| \geq |c_n| \quad \text{i} \quad |a_i| \geq |b_i| + |c_i| \quad \text{dla } i = 2, 3, \dots, n-1,$$

to do rozwiązania układu (4.9) można stosować metodę eliminacji Gaussa bez wyboru elementu podstawowego. Lepsza, tj. o mniejszym nakładzie obliczeń, jest jednak metoda Crouta, która polega na rozkładzie macierzy T na iloczyn LU, gdzie macierze L i U mają postacie

$$L = \begin{bmatrix} l_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ c_2 & l_2 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & c_3 & l_3 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & c_{n-1} & l_{n-1} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & c_n & l_n \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 1 & u_1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & u_2 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 1 & u_{n-1} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

Następnie rozwiązuje się układy równań liniowych

$$Ly = d \;\text{ i }\; Ux = y$$

na podstawie wzorów:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{d_1}{a_1}, \\ u_1 &= \frac{b_1}{a_1}, \\ u_i &= \frac{b_i}{a_i - u_{i-1}c_i}, \quad i = 2, 3, \dots, n-1, \\ y_{i+1} &= \frac{d_{i+1} - c_{i+1}y_i}{a_{i+1} - u_i c_{i+1}}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1, \\ x_n &= y_n, \\ x_i &= y_i - u_i x_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1. \end{aligned} \tag{4.10}$$

Otrzymany wektor x jest rozwiązaniem układu (4.9).

Przykład 4.1

Rozwiążmy metodą Crouta układ równań liniowych

$$\begin{aligned} 3x_1 + x_2 \phantom{{}-x_3} &= 0, \\ x_1 + 2x_2 - x_3 &= 1, \\ -x_2 + 3x_3 &= 0. \end{aligned}$$

Na podstawie wzorów (4.10) mamy:

$$\begin{aligned} y_1 &= \frac{d_1}{a_1} = \frac{0}{3} = 0, \\ u_1 &= \frac{b_1}{a_1} = \frac{1}{3}, \\ u_2 &= \frac{b_2}{a_2 - u_1 c_2} = \frac{-1}{2 - \frac{1}{3}\cdot 1} = -\frac{3}{5}, \end{aligned}$$

$$y_2 = \frac{d_2 - c_2 y_1}{a_2 - u_1 c_2} = \frac{1 - 1 \cdot 0}{2 - \frac{1}{3} \cdot 1} = \frac{3}{5},$$

$$y_3 = \frac{d_3 - c_3 y_2}{a_3 - u_2 c_3} = \frac{0 - (-1) \cdot \frac{3}{5}}{3 - \left(-\frac{3}{5}\right) \cdot (-1)} = \frac{1}{4},$$

$$x_3 = y_3 = \frac{1}{4},$$

$$x_2 = y_2 - u_2 x_3 = \frac{3}{5} - \left(-\frac{3}{5}\right) \cdot \frac{1}{4} = \frac{3}{4},$$

$$x_1 = y_1 - u_1 x_2 = 0 - \frac{1}{3} \cdot \frac{3}{4} = -\frac{1}{4}.$$

Można policzyć, że w celu znalezienia rozwiązania należało wykonać 5 dzieleń, 7 mnożeń oraz 7 odejmowań, czyli łącznie 19 działań. Pozostawiamy Czytelnikowi sprawdzenie, że zastosowanie metody eliminacji Gaussa wymaga wykonania 6 dzieleń, 11 mnożeń i 11 odejmowań, a więc łącznie 28 działań, a metody opartej na rozkładzie Choleskiego – 9 dzieleń, 10 mnożeń, 10 odejmowań i 3 pierwiastkowań, czyli razem 32 działań. ■

4.5. Oszacowania błędów

Zajmiemy się teraz oszacowaniem wpływu zaburzeń macierzy A i wektora b na rozwiązanie x układu równań liniowych $Ax = b$.

Załóżmy najpierw, że zaburzony jest wektor b o wielkość Δb. Wówczas odpowiada mu rozwiązanie zaburzone $x + \Delta x$, czyli mamy

$$A(x + \Delta x) = b + \Delta b.$$

Ponieważ $Ax = b$, więc

$$A \Delta x = \Delta b,$$

skąd

$$\Delta x = A^{-1} \Delta b$$

i mamy

$$\| \Delta x \| \le \| A^{-1} \| \| \Delta b \|. \tag{4.11}$$

Z równości $b = Ax$ otrzymujemy

$$\| b \| = \| Ax \| \le \| A \| \| x \|.$$

Stąd oraz z nierówności (4.11) mamy

$$\frac{\| \Delta x \|}{\| x \|} \le \| A \| \| A^{-1} \| \frac{\| \Delta b \|}{\| b \|} = \mathrm{cond}(A) \frac{\| \Delta b \|}{\| b \|}.$$

Wielkość $\mathrm{cond}(A) = \| A \| \| A^{-1} \|$ nazywa się *wskaźnikiem uwarunkowania* macierzy A. Jest ona miarą wrażliwości względnego błędu rozwiązania x na zaburzenia prawej strony b układu równań liniowych $Ax = b$. Ponieważ

$$1 = \| I \| = \| AA^{-1} \| \le \| A \| \| A^{-1} \| = \mathrm{cond}(A),$$

gdzie I oznacza macierz jednostkową, więc zawsze mamy $\mathrm{cond}(A) \ge 1$.

Rozważmy teraz zaburzenie macierzy A. Udowodnimy najpierw

Lemat 4.1. *Jeżeli macierz F stopnia n jest taka, że $\| F \| < 1$, to istnieje macierz $(I + F)^{-1}$ oraz*

$$\left\| (I+F)^{-1} \right\| \le \frac{1}{1 - \| F \|}. \tag{4.12}$$

Dowód. Mamy

$$\| (I+F)x \| = \| x + Fx \| \ge \| x \| - \| Fx \| \ge \| x \| - \| F \| \| x \| = (1 - \| F \|) \| x \|.$$

Z założenia $\| F \| < 1$, czyli $1 - \| F \| > 0$, skąd wynika, że $\| (I+F)x \| > 0$ dla $x \ne 0$, a to oznacza, że równanie $(I + F)x = 0$ ma tylko rozwianie $x = 0$, a macierz $I + F$ jest nieosobliwa. Istnieje więc macierz $(I + F)^{-1}$.

W celu udowodnienia nierówności (4.12) zauważmy, że

$$\begin{aligned} 1 = \| I \| &= \left\| (I+F)(I+F)^{-1} \right\| = \left\| (I+F)^{-1} + F(I+F)^{-1} \right\| \\ &\ge \left\| (I+F)^{-1} \right\| - \| F \| \left\| (I+F)^{-1} \right\| = \left\| (I+F)^{-1} \right\| (1 - \| F \|) > 0. \end{aligned}$$

Stąd

$$1 \ge \left\| (I+F)^{-1} \right\| (1 - \| F \|),$$

czyli otrzymujemy nierówność (4.12). ■

Wpływ zaburzenia macierzy A na rozwiązanie x układu równań liniowych $Ax = b$ charakteryzuje poniższe

Twierdzenie 4.3. *Niech A oznacza macierz nieosobliwą stopnia n, $B = A(I + F)$, gdzie $\| F \| < 1$. Niech wielkości x i Δx będą określone równościami $Ax = b$ i $B(x + \Delta x) = b$. Wówczas*

$$\frac{\| \Delta x \|}{\| x \|} \le \frac{\| F \|}{1 - \| F \|}. \tag{4.13}$$

Ponadto, jeśli

$$\mathrm{cond}(A) \frac{\| B - A \|}{\| A \|} < 1,$$

to

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\mathrm{cond}(A)}{1-\mathrm{cond}(A)\dfrac{\|B-A\|}{\|A\|}} \cdot \frac{\|B-A\|}{\|A\|}. \tag{4.14}$$

Dowód. Z lematu 4.1 wynika, że istnieje macierz B^{-1}. Ponadto mamy

$$\Delta x = B^{-1}b - x = B^{-1}b - A^{-1}b = B^{-1}(A-B)A^{-1}b$$

i

$$x = A^{-1}b.$$

Otrzymujemy zatem

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \le \frac{\|B^{-1}(A-B)\|\|A^{-1}b\|}{\|x\|} = \|B^{-1}(A-B)\|.$$

Ponieważ

$$B^{-1} = (I+F)^{-1}A^{-1} \quad \mathrm{i} \quad A-B = A - A(I+F),$$

więc z powyższej nierówności wynika, że

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \le \|(I+F)^{-1}A^{-1}[A-A(I+F)]\|$$
$$= \|-(I+F)^{-1}A^{-1}AF\| \le \|(I+F)^{-1}\|\|F\|$$

i z uwagi na nierówność (4.12) otrzymujemy oszacowanie (4.13).

Ponieważ

$$F = A^{-1}(B-A)$$

i

$$\|F\| = \|A^{-1}(B-A)\| \le \|A^{-1}\|\|B-A\| = \frac{\|A^{-1}\|\|A\|\|B-A\|}{\|A\|}$$
$$= \mathrm{cond}(A)\frac{\|B-A\|}{\|A\|},$$

więc nierówność (4.14) jest oczywista. ■

4.6. Metody iteracyjne

Metody iteracyjne rozwiązywania układu równań liniowych $Ax = b$ polegają na konstrukcji ciągu przybliżeń $\{x^{(i)}\}$ $(i = 1, 2, \dots)$ zbieżnego do wektora x. W celu sformułowania twierdzenia o zbieżności tego ciągu do poszukiwanego rozwiązania, konieczne są pewne pojęcia.

Definicja 4.2. Jeżeli dla pewnego niezerowego wektora v, wektor Av jest równoległy do wektora v, to wektor v nazywamy *wektorem własnym* macierzy A.