

20. Метод Гаусса и явление плохой  
обусловленности. LU-разложение матрицы.  
Подпрограммы DECOMP и SOLVE

Андрей Бареков      Ярослав Пылаев  
По лекциям Устинова С.М.

January 16, 2020

## 1 Явление плохой обусловленности матриц

Дана линейная алгебраическая система:

$$Ax = b, \quad \det(A) \neq 0, \quad (1)$$

$A$  – квадратная матрица,

$b$  – заданный вектор-столбец,

$x$  – искомый вектор-столбец.

Как погрешность в исходных данных влияет на точность решения?

Если малые изменения в исходной информации приводят к сильному изменению решения, то такая матрица (и сама система (1)) называется *плохо обусловленной*.

Получим *количественные характеристики* плохой обусловленности.

I.

$$\begin{aligned} b &\rightarrow b + \Delta b \Rightarrow x \rightarrow x + \Delta x, \\ A(x + \Delta x) &= b + \Delta b, \quad Ax + A\Delta x = b + \Delta b, \\ A\Delta x &= \Delta b, \quad \Delta x = A^{-1}\Delta b, \end{aligned}$$

$$\|\Delta x\| \leq \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta b\|, \quad \|b\| \leq \|A\| \cdot \|x\|,$$

перемножим эти два неравенства и разделим результат на  $\|x\| \cdot \|b\|$ :

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \underbrace{\|A\| \cdot \|A^{-1}\|}_{\text{cond}(A)} \cdot \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}.$$

$$\begin{aligned} \frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} &- \text{относительная погрешность результата,} \\ \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} &- \text{относительная погрешность исходных данных.} \end{aligned}$$

$\text{cond}(A)$  - *число обусловленности матрицы* или коэффициент усиления погрешности. Если  $\text{cond}(A) \gg 1$ , то система - плохо обусловлена.

II.

$$\begin{aligned}
A \rightarrow A + \Delta A &\Rightarrow x \rightarrow x + \Delta x, \\
(A + \Delta A)(x + \Delta x) &= b, \\
\cancel{Ax} + A\Delta x + \Delta A(x + \Delta x) &= b, \\
A^{-1} \Big| \quad A\Delta x &= -\Delta A(x + \Delta x), \\
\Delta x &= A^{-1} \Delta A(x + \Delta x), \\
\text{берем норму и делим на } \|x + \Delta x\| : \\
\frac{\|\Delta x\|}{\|x + \Delta x\|} &\leq \|A^{-1}\| \cdot \|\Delta A\| \cdot \frac{\|A\|}{\|A\|}, \\
\frac{\|\Delta x\|}{\|x + \Delta x\|} &\leq \underbrace{\|A\| \cdot \|A^{-1}\|}_{\text{cond}(A)} \cdot \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}.
\end{aligned}$$

Пример:

$$\begin{aligned}
10^{-5} &\leq \underline{10^7} \cdot 10^{-12} - \text{погрешность размерной сетки,} \\
10 &\leq \underline{10^4} \cdot 10^{-3} - \text{инженерная погрешность}
\end{aligned}$$

Таким образом, все зависит от задачи.

Существуют и другие числа обусловленности, так плохо обусловленной матрицей является матрица с большим разбросом собственных значений:

$$k(A) = \frac{|\lambda_k|_{\max}}{|\lambda_k|_{\min}}.$$

Легко показать, что  $k(A) \leq \text{cond}(A)$ :

$$\begin{aligned}
\frac{|\lambda_k|_{\max}}{|\lambda_k|_{\min}} &\leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\|, \\
\text{по Следствию 2 к Теореме 5 } |\lambda_k| &\leq \|A\|, \quad \frac{1}{|\lambda_k|} \geq \|A^{-1}\|.
\end{aligned}$$

Покажем, что матрица с большим разбросом собственных значений является плохо обусловленной, что приводит к большой погрешности.

*Утверждение 1.* Максимальные по модулю элементы матрицы  $A$  имеют величину порядка  $|\lambda_k|_{\max}$ , а могут и значительно ее превышать. Это следует из неравенства  $|\lambda_k| \leq \|A\|$ .

*Утверждение 2.* Собственные значения  $\lambda_k$  могут изменяться на величину порядка элементов матрицы возмущения  $\Delta A$ .

$$\begin{aligned}\Delta A &= \varepsilon E, & A + \Delta A &\rightarrow A + \varepsilon E, \\ A &\rightarrow \lambda_k, & A + \varepsilon E &\rightarrow \lambda_k + \varepsilon.\end{aligned}$$

Пусть относительная погрешность элементов матрицы  $A$   $\delta \ll 1$ .

*Шаг 1.*

$$\begin{aligned}\Delta A &\rightarrow \delta |a_{ik}|_{\max}, \\ \text{по утверждению 1: } \Delta A &\rightarrow \delta |\lambda_k|_{\max}.\end{aligned}$$

*Шаг 2.* В соответствии с утверждением 2  $\lambda_k \pm \delta |\lambda_k|_{\max}$ .  $|\lambda_k|_{\max}$  изменится крайне незначительно, а  $|\lambda_k|_{\min}$  может измениться достаточно сильно.

*Шаг 3.*

$$\begin{aligned}A &\rightarrow \lambda_k, A^{-1} \rightarrow \frac{1}{\lambda_k}, \\ \frac{1}{|\lambda_k|_{\min}} &\text{ — самые большие собственные значения } A^{-1}.\end{aligned}$$

Если  $|\lambda_k|_{\min}$  изменилось сильно, то сильно изменились элементы обратной матрицы, а, следовательно, сильно изменилось решение.

Врем в *min* собственном значении, значит врем в обратной матрице.

$$\begin{aligned}Ax &= b, \\ x &= A^{-1}b,\end{aligned}$$

Описанные неприятности будут появляться тем быстрее, чем *больше разброс* элементов матрицы  $A$ .

## 2 Метод Гаусса

Методы решения системы (1) делятся на две большие группы:

- точные,
- итерационные.

*Точные* методы в отсутствии ошибок округления позволяют получить точные решения за конечное число арифметических операций. В ходе применения *итерационных* методов рождается последовательность векторов, сходящихся к решению.

Типичный точный метод - **метод Гаусса**. Его "грубая" схема выглядит следующим образом:

*Прямой ход.* В первом уравнении делим все на  $a_{11}$ , выразим  $x_1$ , подставляем во все остальные уравнения и приводим подобные. Аналогично из второго уравнения *исключаем*  $x_2$  и т.д. В результате получаем верхнюю треугольную матрицу.

*Обратный ход.*

$$\begin{pmatrix} * & * & * \\ & * & * \\ 0 & & * \end{pmatrix}$$

Из последнего уравнения находим  $x_N$ , из предпоследнего -  $x_{N-1}$ , и т.д.

Недостаток "грубой" схемы - возможное деление на нулевой или близкий к нулю элемент. Для его устранения используется *выбор ведущего элемента*.

*Вариант 1.* На  $k$ -м шаге в оставшейся матрице находят самый большой по модулю элемент. Затем строки и столбцы меняют так, чтобы этот элемент поменялся местами с  $a_{kk}$ ,

$$\begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & a_{kk} & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \end{pmatrix}.$$

Делим уже на него и далее по алгоритму. *Но* в этом варианте при перестановке столбцов меняется нумерация компонент вектора  $x$ .

*Вариант 2.* На  $k$ -м шаге максимальный по модулю элемент разыскивают только в  $k$ -м столбце, в таком случае переставляются только строки. На практике этот вариант используют чаще.

## 2.1 Требования к хорошей программе метода Гаусса

1. Должен быть реализован выбор ведущего элемента.

2. Программа должна оценивать число обусловленности матрицы -  $cond(A)$ .
3. Программа должна эффективно решать несколько систем уравнений с одной и той же матрицей  $A$  и различными векторами  $b$ .

Реализовать 3-е требование помогает  $LU$ -разложение матриц.

### 3 $LU$ -разложение матрицы

$LU$ -разложение матрицы - представление матрицы в следующем виде:

$$A = LU, \text{ где}$$

$L$  — левая треугольная матрица с единичной диагональю,

$U$  — правая треугольная матрица, на диагонали - все, что угодно.

Если  $LU$ -разложение построено, то решение исходной системы  $Ax = b$  сводится к решению двух систем с треугольными матрицами:

$$Ly = b, \tag{2}$$

$$Ux = y. \tag{3}$$

ввели  
обознач.

$LU$ -разложение выполняется однократно, а системы (2) и (3) решаются столько раз, сколько имеется различных векторов  $b$ .

#### 3.1 Пример - матрица $4 \times 4$

$$A = A_0 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \end{pmatrix},$$

Рассмотрим левую треугольную матрицу  $M_1$ , которая отличается от единичной первым столбцом:

$$M_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ -a_{21}/a_{11} & 1 & 0 & 0 \\ -a_{31}/a_{11} & 0 & 1 & 0 \\ -a_{41}/a_{11} & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

Умножим исходную матрицу на матрицу  $M_1$  слева:

$$A_1 = M_1 A_0 = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & \dots & a_{14}^* \\ 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix}.$$

На втором шаге строим матрицу  $M_2$ , которая отличается от единичной вторым столбцом (\* - элементы матрицы  $A_1$ ):

$$M_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -a_{32}^*/a_{22}^* & 1 & 0 \\ 0 & -a_{42}^*/a_{22}^* & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$A_2 = M_2 A_1 = \begin{pmatrix} + & + & \dots & a_{14}^{**} \\ 0 & + & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \end{pmatrix},$$

+ - элементы не обязательно нулевые.

На последнем шаге умножаем  $A_2$  на  $M_3$ , где

$$M_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -a_{43}^{**}/a_{33}^{**} & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$A_3 = M_3 A_2 = \underbrace{M_3 M_2 M_1}_M A = U,$$

$$M^{-1} \Big| \quad MA = U,$$

$$A = M^{-1}U, \quad M^{-1} = L,$$

$$A = LU.$$

Здесь учитывались "Задачи на матрицы" 6 и 7.

## 4 Подпрограммы DECOMP и SOLVE

Программное обеспечение состоит из двух программ:

- *DECOMP*(*NDIM*, *N*, *A*, *COND*, *IPVT*, *WORK*)

Выполняет *LU* разложение матрицы,

*NDIM* - длина столбца матрицы *A* в операторе описания,

*N* - порядок матрицы (системы уравнений),

*A* - исходная матрица, в ней же будут размещены матрицы *L* и *U*,

*COND* - оценка числа обусловленности, *выходной*

*IPVT* - вектор индексов ведущих элементов, его *k*-я компонента указывает, какое уравнение используется для исключения  $x_k$  на *k*-м шаге,

*WORK* - одномерный рабочий массив (размерность *N*).

- $SOLVE(NDIMgit, N, A, B, IPVT)$

Решает системы (2) и (3) с треугольными матрицами,  
 $B$  - вектор решения  $x$ , сначала в нем правые части системы (1).

$$DECOMP \sim N^3, \frac{1}{3}N^3 \text{ (для больших } N),$$

$$SOLVE \sim N^2.$$

#### 4.1 Нахождение обратной матрицы с помощью программ DECOMP и SOLVE

$X = A^{-1}$ ,  $x_k$  -  $k$ -й столбец обратной матрицы.

$$AX = E,$$

$$\underbrace{Ax_k = e_k}_{k=1,2,\dots,N}, \quad e_k - k\text{-й столбец единичной матрицы.}$$

Однократно вызывается программа  $DECOMP$  и строится  $LU$ -разложение матрицы.

Цикл по  $k$  от 1 до  $N$ :

$$e_k \rightarrow B,$$

$$SOLVE(\dots, A, B, \dots),$$

$$B \rightarrow k\text{-й столбец } A^{-1}.$$