Лекция 8

§ 5.5. Метод Гаусса. LU – разложение.

Рассмотрим один из самых распространенных методов решения СЛАУ – метод Гаусса. Вычисления с помощью метода Гаусса состоят из двух этапов, называемых *прямым ходом* и *обратным ходом*. Прямой ход заключается в последовательном исключении неизвестных из системы (5.1) для преобразования ее к эквивалентной системе с верхней треугольной матрицей. Вычисления значений неизвестных производят на этапе обратного хода.

1.Схема единственного деления. Рассмотрим сначала простейший вариант метода Гаусса для решения системы линейных алгебраических уравнений $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$, называемый *схемой единственного деления.*

П р я м о й х о д состоит из m – 1 шагов исключения неизвестных из системы (5.1).

1-й ш а г. Целью этого шага является исключение неизвестного x_1 из уравнений с номерами i = 2, 3, … , m. Предположим, что коэффициент $a_{11} \neq 0$. Будем называть его *главным (или ведущим) элементом 1-го шага.*

Найдем величины

$$\mu_{i1} = a_{i1}/\, a_{11} \quad (i = 2, 3, \dots ,m), \tag{5.25}$$

называемые *множителями 1-го шага*. Вычтем последовательно из второго, третьего, … , m-го уравнений системы (5.1) первое уравнение, умноженное соответственно на $\mu_{21}, \mu_{31}, \dots \mu_{m1}$. Это позволит обратить в нуль коэффициенты при x_1 во всех уравнениях, кроме первого. В результате получим эквивалентную систему

$$\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1m}x_m &= b_1, \\
a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \dots + a_{2m}^{(1)}x_m &= b_2^{(1)}, \\
a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + \dots + a_{3m}^{(1)}x_m &= b_3^{(1)}, \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\
a_{m2}^{(1)}x_2 + a_{m3}^{(1)}x_3 + \dots + a_{mm}^{(1)}x_m &= b_m^{(1)},
\end{aligned} \tag{5.26}$$

в которой $a_{ij}^{(1)}$ и $b_i^{(1)}$ $(i, j = 2, 3, \dots, m)$ вычисляются по формулам

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - \mu_{i1}a_{1j}, \; b_i^{(1)} = b_i - \mu_{i1}b_1. \tag{5.27}$$

Таким образом, в результате 1-го шага исключения по схеме единственного деления система уравнений (5.2) $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ приводится к виду

$$A^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}, \tag{5.28}$$

где

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1m} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2m}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} & \dots & a_{3m}^{(1)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{m2}^{(1)} & a_{m3}^{(1)} & \dots & a_{mm}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(1)} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \dots \\ b_m^{(1)} \end{bmatrix},$$

а коэффициенты $a_{ij}^{(1)}$, $b_i^{(1)}$ вычисляются по формулам (5.25), (5.27).

Представим алгоритм вычисления 1-го шага в матричном виде. Введем матрицу

$$\boldsymbol{M}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\mu_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\mu_{31} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -\mu_{m1} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}.$$

Как нетрудно проверить, справедливы равенства

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = \boldsymbol{M}_1\boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{b}^{(1)} = \boldsymbol{M}_1\boldsymbol{b},$$

т.е. преобразование системы (5.2) к виду (5.28) эквивалентно умножению левой и правой частей системы (5.2) на матрицу $\boldsymbol{M}_1$.

2-й ш а г. Целью этого шага является исключение неизвестного x_2 из уравнений с номерами i = 3, 4, … , m. Предположим, что коэффициент $a_{22}^{(1)} \neq 0$. Будем называть его *главным (или ведущим) элементом 2-го шага.* Вычислим множители 2-го шага

$$\mu_{i2} = a_{i2}^{(1)} / a_{22}^{(1)} \quad (i = 3, 4, \dots, m)$$

и вычтем последовательно из третьего, четвертого,… , m-го уравнений системы (5.26) второе уравнение, умноженное соответственно на μ_{32}, $\mu_{42}, \dots \mu_{m2}$. Это позволит обратить в нуль коэффициенты при x_2 во всех уравнениях, кроме первого и второго. В результате получим эквивалентную систему

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1m}x_m &= b_1, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \dots + a_{2m}^{(1)}x_m &= b_2^{(1)}, \\ a_{33}^{(2)}x_3 + \dots + a_{3m}^{(2)}x_m &= b_3^{(2)}, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ a_{m3}^{(2)}x_3 + \dots + a_{mm}^{(2)}x_m &= b_m^{(2)}, \end{aligned} \qquad (5.29)$$

в которой коэффициенты $a_{ij}^{(2)}$ и $b_i^{(2)}$ $(i, j = 3, 4, \dots, m)$ вычисляются по формулам

$$a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - \mu_{i2}a_{2j}^{(1)}, \quad b_i^{(2)} = b_i^{(1)} - \mu_{i2}b_2^{(1)}. \qquad (5.30)$$

Таким образом, в результате 2-го шага исключения по схеме единственного деления система уравнений $A^{(1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(1)}$приводится к виду

$$A^{(2)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(2)},$$

где

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1m} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2m}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3m}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & a_{m3}^{(2)} & \dots & a_{mm}^{(2)} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b}^{(2)} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \dots \\ b_m^{(2)} \end{bmatrix},$$

а коэффициенты $a_{ij}^{(2)}$, $b_i^{(2)}$ вычисляются по формулам (5.30).

Представим алгоритм вычислений 2-го шага в матричном виде. Введем матрицу

$$\boldsymbol{M}_2 = \begin{bmatrix} 1 \quad 0 \quad 0 \ldots 0 \\ 0 \quad 1 \quad 0 \ldots 0 \\ 0 - \mu_{32}\ 1 \ldots 0 \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ 0 - \mu_{m2}\ 0 \ldots 1 \end{bmatrix}.$$

Как нетрудно проверить, справедливы равенства

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \boldsymbol{M}_2\boldsymbol{A}^{(1)}, \quad \boldsymbol{b}^{(2)} = \boldsymbol{M}_2\boldsymbol{b}^{(1)},$$

т.е. преобразование системы (5.26) к виду (5.29) эквивалентно умножению левой и правой частей системы (5.26) на матрицу $\boldsymbol{M}_1$.

Аналогично проводятся остальные шаги. Опишем очередной k-й шаг.

k-й ш а г. В предположении, что *главный (ведущий) элемент* k-го шага $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, вычислим *множители k-го шага*

$$\mu_{ik} = a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)} \quad (i = k+1, k+2, \ldots, m)$$

И вычтем последовательно из (k+1)-го,…, m-го уравнений полученной на предыдущем шаге системы k-е уравнение, умноженное соответственно на $\mu_{k+1,k}, \mu_{k+2,k}, \ldots \mu_{mk}$.

После ($m-1$)-го шага исключения получим эквивалентную систему уравнений

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \ldots + a_{1m}x_m &= b_1, \\ a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + \ldots + a_{2m}^{(1)}x_m &= b_2^{(1)}, \\ a_{33}^{(2)}x_3 + \ldots + a_{3m}^{(2)}x_m &= b_3^{(2)}, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \\ a_{mm}^{(m-1)}x_m &= b_m^{(m-1)}, \end{aligned} \tag{5.31}$$

Матрица $\boldsymbol{A}^{(m-1)}$ которой является верхней треугольной. То есть после ($m-1$)-го шага, завершающего прямой ход, система оказывается приведенной к виду

$$\boldsymbol{A}^{(m-1)}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}^{(m-1)}. \tag{5.32}$$

Здесь $\boldsymbol{A}^{(\boldsymbol{m-1})} = \boldsymbol{M}_{m-1}\boldsymbol{A}^{(\boldsymbol{m-2})}$, $\boldsymbol{b}^{(\boldsymbol{m-1})} = \boldsymbol{M}_{m-1}\boldsymbol{b}^{(\boldsymbol{m-2})}$,

$$\boldsymbol{A}^{(\boldsymbol{m-1})} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1m} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2m}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3m}^{(2)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{mm}^{(m-1)} \end{bmatrix}, \boldsymbol{M}_{m-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\mu_{m,m-1} & 1 \end{bmatrix}.$$

$$\boldsymbol{b}^{(\boldsymbol{m-1})} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(2)} \\ \dots \\ b_m^{(m-1)} \end{bmatrix}.$$

Заметим, что матрица $\boldsymbol{A}^{(\boldsymbol{m-1})}$ получена из матрицы $\boldsymbol{A}$ последовательным умножением на $\boldsymbol{M}_1$, $\boldsymbol{M}_2$, ..., $\boldsymbol{M}_{m-1}$:

$$\boldsymbol{A}^{(\boldsymbol{m-1})} = \boldsymbol{M}_{m-1} \dots \boldsymbol{M}_2 \boldsymbol{M}_1 \boldsymbol{A} \tag{5.33}$$

Аналогично,

$$\boldsymbol{b}^{(\boldsymbol{m-1})} = \boldsymbol{M}_{m-1} \dots \boldsymbol{M}_2 \boldsymbol{M}_1 \boldsymbol{b} \tag{5.34}$$

Из равенства (5.33) вытекает следующее представление:

$$\boldsymbol{A} = M_1^{-1} M_2^{-1} \dots M_{m-1}^{-1} A^{(m-1)} \tag{5.35}$$

Как легко проверить,

$$M_1^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots 0 \\ \mu_{21} & 1 & 0 & \dots 0 \\ \mu_{31} & 0 & 1 & \dots 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mu_{m1} & 0 & 0 & \dots 1 \end{bmatrix}, \quad M_2^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots 0 \\ 0 & \mu_{32} & 1 & \dots 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \mu_{m2} & 0 & \dots 1 \end{bmatrix}, \dots,$$

$$M_{m-1}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ldots 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \ldots 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 \ldots 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \ldots \mu_{m,m-1} & 1 \end{bmatrix}.$$

Для этого достаточно перемножить матрицы M_k^{-1} и M_k (k=1, 2, …, m-1), в результате чего получится единичная матрица.

Введем обозначения $\boldsymbol{U} = A^{(m-1)}$, $\boldsymbol{L} = M_1^{-1}M_2^{-1} \ldots M_{m-1}^{-1}$. Вычисляя матрицу $\boldsymbol{L}$, убеждаемся, что она имеет следующий вид:

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \ldots 0 \\ \mu_{21} & 1 & 0 \ldots 0 \\ \mu_{31} & \mu_{32} & 1 \ldots 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ \mu_{m1} & \mu_{m2} & \mu_{m3} \ldots 1 \end{bmatrix}. \qquad (5.36)$$

Тогда равенство (5.35) в новых обозначениях примет вид

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}. \qquad (5.37)$$

Это и есть *LU-разложение матрицы* $\boldsymbol{A}$ – представление матрицы $\boldsymbol{A}$ в виде произведения нижней треугольной матрицы $\boldsymbol{L}$ и верхней треугольной матрицы $\boldsymbol{U}$.

Таким образом, прямой ход метода Гаусса можно рассматривать как процесс вычисления LU- разложения матрицы системы, на k-м шаге которого определяются элементы k-го столбца матрицы $\boldsymbol{L}$ и k-й строки матрицы $\boldsymbol{U}$.

Обратный ход. Из последнего уравнения системы (5.31) находим x_m. Подставляя найденное значение x_m в предпоследнее уравнение, получим x_{m-1}. Осуществляя обратную подстановку далее, находим последовательно $x_{m-2}, x_{m-3}, \ldots, x_1$. Вычисления неизвестных здесь проводятся по формулам

$$x_m = b_m^{(m-1)}/a_{mm}^{(m-1)}, \qquad (5.38)$$

$$x_k = (b_k^{(k-1)} - a_{k,k+1}^{(k-1)}x_{k+1} - \cdots - a_{km}^{(k-1)}x_m)/\, a_{kk}^{(k-1)},$$

(k=m−1, … ,1)

Т р у д о е м к о с т ь м е т о д а. Не вдаваясь в подробные вычисления, скажем лишь, что общее число операций прямого хода Q ≈ 2/3 m^3. Как нетрудно видеть, для реализации обратного хода по формулам (5.38) нужно всего m^2 операций, что при больших m пренебрежимо мало по сравнению с числом операций прямого хода.

Таким образом, для реализации метода Гаусса по схеме единственного деления требуется примерно (2/3 m^3 + m^2) операций, причем подавляющее число этих операций совершается на этапе прямого хода.

Н е д о с т а т о к с х е м ы е д и н с т в е н н о г о д е л е н и я. Заметим, что вычисление множителей μ_{ij}, а также обратная подстановка требуют деления на главные (или ведущие) элементы $a_{kk}^{(k-1)}$. Поэтому, если один из главных элементов оказывается равным нулю, то схема единственного деления не может быть реализована. Даже если все главные элементы отличны от нуля, но среди них есть близкие к нулю, возможен неконтролируемый рост погрешности. Таким образом, метод может оказаться некорректным, т.е. привести к аварийному останову (если $a_{kk}^{(k-1)} = 0$ при некотором k) и вычисления по нему могут оказаться неустойчивыми. Для преодоления указанного недостатка применяются другие варианты метода Гаусса. Рассмотрим два из них.

2. Метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу (схема частичного выбора).

О п и с а н и е м е т о д а. На k-м шаге прямого хода коэффициенты уравнений системы с номерами $i = k+1, \ldots, m$ преобразуются по формулам

$$a_{ij}^{(k)} = a_{ij}^{(k-1)} - \mu_{ik} a_{kj}^{(k-1)},\ b_i^{(k)} = b_i^{(k-1)} - \mu_{ik} b_k^{(k-1)},\ i = k+1, \ldots, m \qquad (5.39)$$

Очевидно, что во избежание сильного роста коэффициентов системы и связанных с этим ошибок нельзя допускать появления больших множителей μ_{ik}.

В методе Гаусса с выбором главного элемента по столбцу гарантируется, что $|\mu_{ik}| \le 1$ для всех $k = 1, 2, \ldots, m-1$ и $i = k+1, \ldots, m$.

Отличие этого варианта метода Гаусса от схемы единственного деления заключается в том, что на k-м шаге исключения в качестве главного элемента выбирают максимальный по модулю коэффициент $a_{i_k k}$ при неизвестной x_k в уравнениях с номерами $i = k, k+1, \ldots, m$. Затем соответствующее выбранному коэффициенту уравнение с номером i_k меняют местами с k-м уравнением системы для того, чтобы главный элемент занял место коэффициента $a_{kk}^{(k-1)}$. После этой перестановки исключение неизвестного x_k производят как в схеме единственного деления.

Заметим, что дополнительная работа по выбору главных элементов в схеме частичного выбора требует порядка m^2 операций, что практически не влияет на общую трудоемкость метода.

Вычислительная устойчивость схемы частичного выбора. Детальное исследование метода Гаусса показывает, что основной причиной неустойчивости схемы единственного деления является возможность неограниченного роста элементов промежуточных матриц $A^{(1)}, A^{(2)}, \ldots, A^{(m-1)}$ в процессе прямого хода. Так как на k-м шаге схемы частичного выбора $|\mu_{ik}| \leq 1$, то для вычисленных по формулам (5.39) элементов $a_{ij}^{(k)}$ справедлива оценка

$|a_{ij}^{(k)}| \leq |a_{ij}^{(k-1)}| + |a_{kj}^{(k-1)}|$. Следовательно, максимальное по модулю значение элементов матрицы возрастает на одном шаге не более чем в два раза и в самом неблагоприятном случае *m-1* шаг прямого хода даст коэффициент роста $\varphi(m) = 2^{m-1}$.

Гарантия ограниченности роста элементов матрицы делает схему частичного выбора вычислительно устойчивой. Более того, для нее оказывается справедливой следующая оценка погрешности:

$$\delta(x^*) < f(m) \cdot \mathrm{cond}_E(\mathbf{A}) \cdot \varepsilon_M. \qquad (5.40)$$

Здесь x^* - вычисленное на ЭВМ решение системы; $\delta(x^*) = \frac{||x-x^*||}{||x||}$ - его относительная погрешность; $\mathrm{cond}_E(\mathbf{A}) = ||\mathbf{A}|| \cdot ||A^{-1}||$ - число обусловленности матрицы **A**; ε_M – машинное эпсилон; наконец, $f(m) = C(m)\,\varphi(m)$, причем $C(m)$ – некоторая медленно растущая функция, зависящая от порядка m системы, а $\varphi(m)$ – коэффициент роста. Наличие в оценке (5.40) множителя $\varphi(m) = 2^{m-1}$ указывает на то, что при большом m схема частичного выбора может оказаться плохо обусловленной и возможна ощутимая потеря точности. Однако практика матричных вычислений показывает, что существенный рост элементов матрицы происходит крайне редко. В подавляющем большинстве случаев действительное значение коэффициента роста не превышает 8 – 10. Если система хорошо обусловлена, то погрешность вычисленного значения оказывается, как правило, малой.

3. Метод Гаусса с выбором главного элемента по всей матрице (схема полного выбора). В этой схеме допускается нарушение естественного порядка исключения неизвестных.

На первом шаге среди элементов a_{ij} выбирается максимальный по модулю элемент $a_{i_1 j_1}$. Первое уравнение системы и уравнение с номером i_1 меняются местами. Далее стандартным образом производят исключение неизвестного x_{j_1} из всех уравнений, кроме первого.

На k-м шаге среди элементов $a_{ij}^{(k-1)}$ при неизвестных в уравнениях системы с номерами $i = k, \dots, m$ выбирают максимальный по модулю элемент $a_{i_k j_k}^{(k-1)}$. Затем k-е уравнение и уравнение, содержащее найденный коэффициент, меняют местами и исключают неизвестное x_{j_k} из уравнений с номерами $i = k+1, \dots, m$.

На этапе обратного хода неизвестные вычисляют в следующем порядке: $x_{j_m}, x_{j_{m-1}}, \dots, x_{j_1}$.

Схема полного выбора по сравнению со схемой частичного выбора дает существенное замедление роста элементов матрицы. Доказано, что для нее коэффициент роста $\varphi(m)$, входящий в оценку (5.40), не превышает величины $1.8\, m^{0.25 \ln(m)}$, что значительно меньше соответствующего значения $\varphi(m) = 2^{m-1}$ для схемы частичного выбора. Подчеркнем, что до сих пор еще не найдено матрицы, для которой полный выбор дал бы значение $\varphi(m) > m$. Таким образом, для хорошо обусловленных систем этот вариант метода Гаусса является хорошо обусловленным.

Однако гарантия хорошей обусловленности достигается здесь ценой значительных затрат на выбор главных элементов. Общая трудоемкость этого варианта метода Гаусса составляет порядка m^3 операций.