

Л.В. Маркова, Е.А. Корчевская

**ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ
СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ
АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ**

Методические рекомендации

2011

УДК 519.6(075.8)
ББК 22.19я73
М26

Авторы: заведующий кафедрой прикладной математики и механики УО «ВГУ им. П.М. Машерова», кандидат физико-математических наук, доцент **Л.В. Маркова**; доцент кафедры прикладной математики и механики УО «ВГУ им. П.М. Машерова», кандидат физико-математических наук **Е.А. Корчевская**

Рецензент:
доцент кафедры информатики и информационных технологий УО «ВГУ им. П.М. Машерова»,
кандидат педагогических наук *Н.Д. Адаменко*

М26

Излагаются общие методические рекомендации, которых следует придерживаться при изучении методов решения систем линейных алгебраических уравнений, выполнении практических заданий. Издание предназначается для студентов специальностей физико-математического профиля.

УДК 519.6(075.8)
ББК 22.19я73

© Маркова Л.В., Корчевская Е.А., 2011
© УО «ВГУ им. П.М. Машерова», 2011

СОДЕРЖАНИЕ

1. РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ.....	4
1.1. Постановка задачи.....	4
1.2. Устойчивость СЛАУ.....	6
1.3. Обусловленность систем линейных алгебраических уравнений. Число обусловленности.....	9
2. ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ.....	11
2.1. Теорема об LU-разложении.....	11
2.2. Смеха единственного деления (методы типа Гаусса).....	12
2.3. Модификации метода Гаусса.....	16
2.3.1. Метод Жордана–Гаусса.....	16
2.3.2. Метод Гаусса с выбором главного элемента.....	17
2.4. Метод квадратного корня.....	19
3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОПРЕДЕЛИТЕЛЕЙ И ОБРАЩЕНИЕ МАТРИЦЫ.....	23
3.1. Нахождение определителя.....	23
3.2. Обращение матрицы.....	24
4. МЕТОД ПРОГОНКИ РЕШЕНИЯ СЛАУ С ТРЕХДИАГОНАЛЬНОЙ МАТРИЦЕЙ.....	27
5. ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ.....	29
5.1. Общая характеристика итерационных методов решения СЛАУ.....	29
5.2. Метод простой итерации.....	34
5.3. Метод Зейделя.....	38
5.4. Метод релаксации.....	42
5.5. Итерационные методы вариационного типа.....	44
5.5.1. Метод минимальных невязок.....	44
5.5.2. Метод минимальных поправок.....	45
5.5.3. Метод скорейшего спуска.....	46
КОНТРОЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ.....	49

3. $A = \{a_{ij}\}$ – симметричная матрица, если $a_{ij} = a_{ji}$ для любых i, j , т.е. ее элементы расположены симметрично относительно главной диагонали;

4. Верхняя треугольная матрица – все элементы, расположенные ниже главной (левой) диагонали, равны нулю;

5. Нижняя треугольная матрица – все элементы, расположенные выше главной (левой) диагонали, равны нулю;

6. Диагональная матрица, когда ненулевыми являются только элементы, расположенные на главной диагонали;

7. Ленточная, или 2-, 3-диагональная, матрица – ненулевые элементы располагаются на главной диагонали и параллельно ей в непосредственной близости;

8. Клеточные матрицы, ненулевые элементы располагаются в виде клеток;

9. Разреженные матрицы – большинство элементов нулевые, могут быть беспорядочно расположенные.

В перечисленных случаях решение системы (1.1) может быть найдено достаточно просто или специальными методами.

Для решения системы (1.1) в общем случае, т.е. с заполненной матрицей, могут быть выбраны прямые или итерационные методы.

Преимущества прямых методов решения СЛАУ:

1. Используют конечные соотношения (формулы) для вычисления неизвестных;

2. Дают решение после выполнения заранее известного числа действий;

3. Обладают сравнительной простотой и универсальностью, а поэтому пригодны для решения широкого класса задач.

Недостатки прямых методов решения СЛАУ:

1. Требуют при больших n значительных объемов оперативной памяти для хранения сразу всей матрицы системы;

2. Не учитывают структуру матрицы (при большом числе нулевых элементов в случае разреженной матрицы, эти элементы занимают оперативную память и над ними производятся арифметические действия);

3. Имеет место накапливание погрешностей в процессе решения, т.к. на любом этапе вычислений используются результаты предыдущих операций;

4. Точное решение получается только теоретически, т.к. неизбежны погрешности вычислений из-за ограниченности разрядной сетки ЭВМ.

Достоинства итерационных методов:

1. Не требуют хранения всей матрицы системы в оперативной памяти, хранятся лишь несколько векторов;

2. Иногда элементы матрицы можно вовсе не хранить, а вычислять по мере необходимости;

3. Погрешности вычислений не накапливаются в окончательном результате, т.к. точность вычислений в каждой итерации (один цикл вычислений) определяется лишь результатом предыдущей и не зависит от ранее выполненных вычислений.

Недостатки итерационных методов:

1. Алгоритмы обычно более сложные по сравнению с точными методами;

2. Необходимо задавать начальное приближение;

3. Объем вычислений заранее определить трудно.

Итерационные методы могут использоваться для уточнения решений, полученных прямыми методами. Такие смешанные алгоритмы обычно довольно эффективны, особенно для плохо обусловленных систем.

1.2. Устойчивость СЛАУ

Рассмотрим СЛАУ n -го порядка (1.2). Прежде чем предлагать метод решения математической задачи, необходимо рассмотреть вопрос о ее корректности.

Определение. Говорят, что задача поставлена корректно, если

- решение задачи существует и является единственным;
- решение задачи устойчиво относительно входных данных,

т.е. непрерывно зависит от входных данных.

Как известно, первое требование в определении для задачи (1.2) будет выполнено, если определитель матрицы A не равен нулю, т.е. $\det A \neq 0$. В этом случае можно определить матрицу A^{-1} , обратную матрице A , и записать решение в виде $X = A^{-1}f$.

Чтобы установить непрерывную зависимость решения от входных данных применительно к задаче (1.1), отметим, что входными данными в задаче решения СЛАУ являются элементы матрицы A и компоненты вектора f . Поэтому соответственно различают **коэффициентную устойчивость** и **устойчивость по правой части**.

Предположим, что A и f заданы с некоторой погрешностью, тогда вместо (1.2) фактически имеем «возмущенную систему»

$$A^* X^* = f^*. \quad (1.3)$$

Необходимо исследовать, как связана абсолютная погрешность решения $\Delta X = X^* - X$ с абсолютными погрешностями коэффициентов матрицы $\Delta A = A^* - A$ и погрешностью столбца свободных членов $\Delta f = f^* - f$. Если возмущается только матрица A , а столбец свободных членов имеет точное значение, то говорят о **коэффициентной устойчивости**. **Устойчивость по правой части** будет исследоваться в том случае, если возмущается только правая часть f , а матрица A остается неизменной.

Прежде, чем дать количественные характеристики этих связей, т.е. говорить о непрерывной зависимости исходных данных и решения, необходимо ввести на множестве n -мерных векторов ту или иную метрику.

Будем считать, что вектор решения $X=(x_1, \dots, x_n)^T$ и столбец свободных членов $f=(f_1, \dots, f_n)^T$ задачи (1.2) принадлежат линейному пространству R^n , состоящему из n -мерных вещественных векторов, и введем в этом пространстве норму $\|\cdot\|$, конкретный вид которой принципиального значения не имеет.

Определение. Нормой вектора X называется поставленное в соответствие этому вектору неотрицательное число $\|X\|$, удовлетворяющее аксиомам:

1. Положительная определенность, т.е. для любого ненулевого вектора его норма больше нуля и равна нулю только для нуля вектора

$$\|X\| > 0 \quad \forall 0 \neq X \in R^n, \quad \|0\| = 0.$$

Однородность $\|\alpha X\| = |\alpha| \|X\|, \quad \forall \alpha = \text{const}, \quad \forall X \in R^n.$

2. $\|Y+X\| \leq \|X\| + \|Y\|, \quad \forall Y, X \in R^n.$

Существует несколько способов введения нормы вектора. Наиболее употребительными являются следующие:

- 1) первая (кубическая) $\|X\|_I = \max |x_i|, \quad 1 \leq i \leq n;$
- 2) вторая (октаэдрическая) $\|X\|_{II} = \sum |x_i|, \quad i=1, \dots, n;$
- 3) третья (сферическая).

$\|X\|_{III} = \sqrt{\langle X, X \rangle} = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2} = \left(\sum x_i^2 \right)^{1/2} \quad i=1, \dots, n$ (иначе – среднеквадратичная).

Определение. Нормой матрицы A называется поставленное этой матрице в соответствие неотрицательное число $\|A\|$ такое, что

1. $\|A\| > 0 \quad \forall 0 \neq A \in H, \quad \|0\| = 0;$
2. $\|\alpha A\| = |\alpha| \|A\| \quad \forall \alpha = \text{const}, \quad \forall A \in H;$
3. $\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|, \quad \forall A, B \in H;$
4. $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|, \quad \forall A, B \in H.$

Здесь H – линейное пространство квадратных матриц n -го порядка.

Норма матрицы, как и норма вектора, может быть определена по-разному:

- 1) первая $\|A\|_I = \max \sum_j |a_{i,j}| \quad 1 \leq i, j \leq n;$
- 2) вторая $\|A\|_{II} = \max \sum_i |a_{i,j}|, \quad 1 \leq i, j \leq n.$

3) третья $\|A\|_{III} = \sqrt{\Lambda}$, где Λ наибольшее собственное значение матрицы A .

Определение. Если для любой матрицы A и любого вектора X выполняется неравенство $\|AX\| \leq \|A\| \|X\|$, то говорят, что норма матрицы согласована с данной нормой вектора.

Определение. Нормой матрицы A , подчиненной данной норме вектора, называется число

$$\|A\| = \sup_{X \neq 0} \frac{\|AX\|}{\|X\|}, \quad 0 \neq X \in \mathbb{R}^n - \text{верхняя грань (т.е. максимальное}$$

число) множества норм такого вида.

Норма матрицы A , подчиненная данной норме вектора, будет наименьшей из всех норм, согласованных с нормой вектора.

Например, норма матрицы, определенная как \max суммы модулей элементов строки матрицы

$$\|A\|_{\Pi} = \max_{j=1, \dots, n} \sum_{i=1}^n |a_{i,j}|,$$

подчинена кубической норме вектора.

Перейдем к получению количественных оценок определения устойчивости. Будем предполагать, что в матрицу A возмущений не вносится, т.е. $\Delta A = A^* - A = 0$, и проанализируем насколько сильно может измениться решение X в результате изменения правой части.

Определение. Говорят, что система (1.2) устойчива по правой части, если при любых f, f^* справедлива оценка

$$\|\Delta X\| \leq M \|\Delta f\|, \quad (1.4)$$

где $M > 0$ – постоянная, не зависящая от правых частей f, f^* .

Оценка (1.4) выражает факт непрерывной зависимости решения от правой части, т.е. показывает, что $\|\Delta X\| \rightarrow 0$ при $\|\Delta f\| \rightarrow 0$.

При численном решении СЛАУ очень важно наличие устойчивости, т.к. почти никогда нельзя задать правую часть точно. Погрешность столбца свободных членов Δf возникает, например, из-за погрешностей округления.

Покажем, что система (1.2) будет устойчивой по правой части, если определитель матрицы A не равен нулю, т.е. $\det A \neq 0$. Запишем (1.3) и учтем, что $\Delta A = 0$. Имеем:

$$A^* X^* = f^* \rightarrow (A + \Delta A)(X + \Delta X) = (f + \Delta f) \rightarrow A(X + \Delta X) = (f + \Delta f) \rightarrow AX + A\Delta X = f + \Delta f \quad (1.5)$$

Из (1.2) имеем

$$AX - f = 0. \quad (1.6)$$

Тогда (1.5), (1.6) дают

$$A\Delta X = \Delta f. \quad (1.7)$$

И т.к. определитель матрицы A не равен 0, из (1.7) имеем

$$\Delta X = A^{-1} \Delta f. \quad (1.8)$$

Переходя к норме, получаем $\|\Delta X\| = \|A^{-1} \Delta f\|$.

Следовательно, на основании аксиом нормы, можем записать

$$\|\Delta X\| \leq \|A^{-1}\| \|\Delta f\|. \quad (1.9)$$

Выражение (1.9) согласно определению (1.4) означает устойчивость решения системы (1.2) по правой части ($M=\|A^{-1}\|$) при условии $\det A \neq 0$. Необходимо подчеркнуть, что, как правило, чем ближе к нулю определитель матрицы A , тем больше постоянная M и, следовательно, тем сильнее погрешность правой части может исказить искомого решение.

1.3. Обусловленность систем линейных алгебраических уравнений. Число обусловленности

В оценку (1.9) входят нормы абсолютных погрешностей решения и правой части задачи (1.2). На практике принято оценивать связь между нормами относительных погрешностей, т.е. величины

$$\frac{\|\Delta X\|}{\|X\|} \quad \text{и} \quad \frac{\|\Delta f\|}{\|f\|}.$$

Т.к. для системы (1.2) из аксиом нормы можно записать

$$\|f\| \leq \|A\| \|X\| \Leftrightarrow \frac{1}{\|X\|} \leq \frac{\|A\|}{\|f\|}, \quad (1.10)$$

то после перемножения (1.9) и (1.10) получаем оценку устойчивости для относительных погрешностей

$$\frac{\|\Delta X\|}{\|X\|} \leq \|A^{-1}\| \|A\| \left(\frac{\|\Delta f\|}{\|f\|} \right), \quad (1.11)$$

обозначим

$$M_A = \|A^{-1}\| \|A\| \quad (1.12)$$

Из (1.11) и (1.12) имеем требуемую оценку устойчивости решения (1.2) по правой части, выраженную через относительные погрешности:

$$\frac{\|\Delta X\|}{\|X\|} \leq M_A \left(\frac{\|\Delta f\|}{\|f\|} \right). \quad (1.13)$$

Определение. Число M_A , входящее в эту оценку (1.13), называют числом обусловленности матрицы A .

Число обусловленности характеризует степень зависимости относительной погрешности решения от относительной погрешности правой части (в общем случае от входных данных). К свойствам числа обусловленности относят следующие:

1. $M_A \geq 1$;
2. $M_A \geq \frac{|\lambda_{\max}(A)|}{|\lambda_{\min}(A)|}$, где $|\lambda_{\max}(A)|$ и $|\lambda_{\min}(A)|$ соответственно

наибольшее и наименьшее по модулю собственные числа матрицы;

$$3. \quad M_{AB} \leq M_A M_B.$$

Докажем свойство 2.

Число $\rho(A) = |\lambda_{\max}(A)|$ называется спектральным радиусом матрицы A . Покажем, что для любой нормы вектора подчиненная ей норма матрицы удовлетворяет неравенству

$$\rho(A) \leq \|A\|.$$

Рассмотрим собственный вектор y матрицы A , отвечающий наибольшему по модулю собственному значению. Справедливо равенство

$$Ay = \lambda_{\max}(A) y,$$

из которого следует, что

$$\|Ay\| = |\lambda_{\max}(A)| \|y\|.$$

С другой стороны, $\|Ay\| \leq \|A\| \|y\|$ и, следовательно, $|\lambda_{\max}(A)| \leq \|A\|$.

Поскольку $\lambda_{\min}^{-1}(A)$ является максимальным по модулю собственным значением матрицы A^{-1} , для него выполняется неравенство

$$|\lambda_{\min}^{-1}(A)| \leq \|A^{-1}\|.$$

Из предыдущего неравенства и из неравенства $|\lambda_{\max}(A)| \leq \|A\|$ следует доказательство свойства 2.

Можно показать, что для симметричной матрицы свойство 2 выполняется со знаком равенства, т.е. если $A = A^T$, то

$$M_A = \frac{|\lambda_{\max}(A)|}{|\lambda_{\min}(A)|}, \quad (\text{норма вектора сферическая (среднеквадратичная)}).$$

Получим количественные оценки для коэффициентной устойчивости. Полагаем, что погрешность столбца свободных членов $\Delta f = f^* - f = 0$ и $\Delta A = A^* - A \neq 0$, но при этом $\det(A + \Delta A) \neq 0$. Тогда из (1.3) получаем

$$X + \Delta X = (A^*)^{-1} f. \quad (1.14)$$

Учитывая, что из (1.2)

$$X = A^{-1} f. \quad (1.15)$$

Получаем

$$\Delta X = ((A^*)^{-1} - A^{-1}) f. \quad (1.16)$$

Используя тождество

$$(A^*)^{-1} - A^{-1} = A^{-1} (A - A^*) (A^*)^{-1},$$

находим, что

$$(A^*)^{-1} - A^{-1} = -A^{-1} \Delta A (A^*)^{-1}.$$

Учитывая предыдущее выражение, равенство (1.16) перепишем в виде:

$$\Delta X = -A^{-1} \Delta A (A^*)^{-1} f. \quad (1.17)$$

С учетом (1.14) перепишем (1.17)

$$\Delta X = -A^{-1} \Delta A (X + \Delta X). \quad (1.18)$$

Переходя к нормам и умножив обе части (1.18) на $\frac{\|A\|}{\|A\|}$, получаем неравенство, означающее коэффициентную устойчивость системы (1.2)

$$\frac{\|\Delta X\|}{\|X + \Delta X\|} \leq \|A^{-1}\| \|A\| \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right). \quad (1.19)$$

С учетом обозначения (1.12), т.е. $M_A = \|A^{-1}\| \|A\|$, получаем

$$\frac{\|\Delta X\|}{\|X + \Delta X\|} \leq M_A \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \right), \quad (1.20)$$

т.е. $\|\Delta X\| \rightarrow 0$ при $\|\Delta A\| \rightarrow 0$. Таким образом условия $\det(A) \neq 0$ и $\det(A + \Delta A) \neq 0$ обеспечивают корректную постановку задачи.

Матрицы с большим числом обусловленности M_A называются плохо обусловленными матрицами. Соответствующие системы вида (1.1) также называются плохо обусловленными. При численном решении таких систем (с плохо обусловленными матрицами) возможно сильное накопление погрешностей, т.к. недопустимо велика правая часть неравенств (1.13), (1.20). Поэтому лишь очень малые погрешности входных данных гарантируют приемлемую относительную погрешность решения.

2. Прямые методы решения СЛАУ

2.1. Теорема об LU-разложении

Пусть требуется решить систему линейных алгебраических уравнений

$$AX=f, \quad (2.1)$$

здесь A – квадратная матрица $n \times n$ с вещественными коэффициентами a_{ij} , $i, j=1, \dots, n$, $f = (f_1, \dots, f_n)^T$ – заданный вектор столбец с вещественными компонентами, $X = (x_1, \dots, x_n)^T$ – искомый вектор столбец.

Будем искать решение этой задачи с помощью прямых методов.

Прямые методы различаются по числу – $Q(A)$ – арифметических действий, необходимых для нахождения решения. Мерой различия может также служить и число арифметических действий, необходимых для вычисления одного неизвестного – $q(A)$. Тогда

$$Q(A) = nq(A).$$

Метод Гаусса (и его модификации) имеет $Q(A) \sim Q(n^3)$. Можно показать, что для произвольной невырожденной матрицы существуют

методы с $Q(A) \sim Mn^\alpha$, где $\alpha = \log_2 7$. Однако их логическая сложность и большая величина постоянной M не дают этим методам практических преимуществ перед методами типа Гаусса. Поэтому считается, что для невырожденной матрицы общего вида среди прямых методов решения задачи (2.1) оптимальными являются методы с оценкой $q(A) = O(n^2)$.

В основе прямых методов лежит теорема об LU-разложении.

Теорема. Пусть все главные миноры матрицы A отличны от нуля, т.е.

$$a_{11} \neq 0, \quad \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \neq 0, \dots, \det(A) \neq 0,$$

тогда матрицу A представить в виде

$$A = LU, \tag{2.2}$$

где L – нижняя, U – верхняя треугольные матрицы

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & \dots & l_{nn} \end{bmatrix} \quad U = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & \dots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & u_{nn} \end{bmatrix}.$$

Эта теорема является типичной теоремой существования, т.е. доказывается возможность представления матрицы A в виде произведения двух треугольных матриц, но не указывается алгоритм построения таких матриц. Однако принципиальное значение этой теоремы заключается именно в доказательстве возможности сведения системы (2.1) к двум системам уравнений с треугольными матрицами

$$LY = f, \quad UX = Y. \tag{2.3}$$

Практически не имеет смысла искать разложение (2.2). Достаточно преобразовать исходную задачу (2.1) к одной из задач вида (2.3). Это и осуществляется в методах последовательного исключения неизвестных (методах типа Гаусса).

Разложение $A = LU$, утверждаемое теоремой, неоднозначно, т.к. существует произвол в определении коэффициентов l_{ij} , u_{ij} , поэтому иногда вместо LU говорят об LDU -разложении матрицы A . В этом случае предполагается, что L – нижняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, U – верхняя треугольная матрица с единичной главной диагональю, D – диагональная матрица.

2.2. Схема единственного деления (методы типа Гаусса)

Процесс решения СЛАУ по методу Гаусса состоит из двух этапов. На первом этапе – *прямой ход* – система (2.1) приводится к треугольному виду. На втором – *обратный ход* – происходит последовательное вычисление искомых неизвестных, начиная с x_n .

Запишем систему (2.1) в развернутом виде

$$c_{kj}^{(k)} = \frac{a_{kj}^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad j=k+1, k+2, \dots, n, \quad k=1, 2, \dots, n-1 \quad (2.8)$$

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

Число $a_{kk}^{(k-1)}$ называется **ведущим** элементом на k -ом этапе исключения. Вычисление правых частей системы (2.7) происходит по формулам

$$f_k^{(0)} = f_k,$$

$$g_k = \frac{f_k^{(k-1)}}{a_{kk}^{(k-1)}}, \quad k=1, 2, \dots, n \quad (2.9)$$

$$f_i^{(k)} = f_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)} g_k, \quad i= k+1, k+2, \dots, n,$$

$$k=1, 2, \dots, n-1$$

Обратный ход состоит в последовательном нахождении неизвестных x_1, x_2, \dots, x_n из системы (2.7) по формулам:

$$x_i = g_i - \sum_{j=i+1}^n c_{ij} x_j, \quad i=n-1, \dots, 1, \quad x_n = g_n \quad (2.10)$$

Прямой ход метода Гаусса преобразует исходную систему уравнений (2.1) в эквивалентную систему

$$CX=g, \quad (2.11)$$

где C – верхняя треугольная матрица (с единицами на главной диагонали). Проанализировав соотношения (2.9), можно записать

$$f=Bg, \quad (2.12)$$

где B – нижняя треугольная матрица с ненулевыми элементами $a_{kk}^{(k-1)}$, $k=1, 2, \dots, n$, $a_{11}^{(0)} = a_{11}$ – на главной диагонали (это основное допущение метода Гаусса). Следовательно матрица B имеет обратную, и тогда можно записать

$$g = B^{-1}f. \quad (2.13)$$

Подставляя (2.13) в уравнение (2.11), получаем

$$CX= B^{-1}f, \quad (2.14)$$

или, что то же самое,

$$BCX=f. \quad (2.15)$$

Сопоставляя выражение (2.15) с уравнением (2.1), отмечаем, что в результате применения метода Гаусса получено разложение исходной матрицы A в произведение двух матриц, т.е. $A=BC$. При этом B – нижняя треугольная матрица с ненулевыми элементами на главной диагонали, C – верхняя треугольная матрица с единичной главной диагональю.

Метод Гаусса целесообразно использовать для систем с плотно заполненной матрицей. Все элементы матрицы и правые части системы уравнений хранятся в оперативной памяти. Объем вычислений определяется порядком системы $\sim(2/3)n^3$.

Таким образом, для системы $AX=f$ методом Гаусса найдено решение X^* , которое может отличаться от точного решения $X=A^{-1}f$. Существуют две величины, характеризующие степень отклонения полученного решения от точного. Разность точного и полученного решений $\Delta X=X-X^*$ называется *погрешностью* решения. Разность между правой и левой частями уравнений при подстановке в них полученного решения, называется *невязкой* $r=f-AX^*$. Можно показать, что если погрешность решения $\Delta X=0$, то невязка тоже $r=0$. Однако обратное выполняется не всегда. В частности, плохо обусловленные системы при малой невязке могут давать большую погрешность решения.

Для контроля расчетов полезно находить значения невязки. Если эти значения окажутся достаточно велики, а система хорошо обусловлена, то это означает грубую ошибку в расчетах.

Пример. Решить систему методом Гаусса.

$$\begin{cases} x_1+2x_2+2x_3=1 & | \text{разделим на } a_{11} = -1 \\ 4x_1-9x_2+2x_3=2 & | \text{вычтем первое уравнение, умноженное} \\ & \text{на } a_{21}, = 4 \\ 2x_1-4x_2+4x_3=3 & | \text{вычтем первое уравнение, умноженное} \\ & \text{на } a_{31}, = 2 \end{cases}$$

получили

$$\begin{cases} x_1 - 2x_2 - 2x_3 = -1 \\ -x_2 + 10x_3 = 6 \\ 8x_3 = 5 \end{cases}$$

обратный ход

$$x_3 = 5/8$$

$$x_2 = -6 + 10 * 5/8 = 1/4$$

$$x_1 = -1 + 2*1/4 + 2*5/8 = 3/4$$

2.3. Модификации метода Гаусса

2.3.1. Метод Жордана–Гаусса

Суть метода Жордана–Гаусса состоит в том, чтобы привести матрицу A к единичному виду, тогда вектор решения равен столбцу свободных членов. Для этого объединяют прямой и обратный ход метода Гаусса. Первый шаг метода Жордана–Гаусса аналогичен первому шагу метода Гаусса, т.е. первое уравнение необходимо разделить на a_{11} – коэффициент при неизвестном x_1 – и исключить это неизвестное – x_1 – из остальных уравнений системы. На втором шаге необходимо исключить неизвестное x_2 из всех уравнений системы (в том числе из первого), кроме второго. На третьем шаге – оставляем неизвестное x_3

только в третьем уравнении и т.д. Столбец свободных членов в последней расширенной матрице и есть решение системы (2.1).

Пусть имеем систему уравнений $AX=f$. Умножим слева обе части уравнения на обратную матрицу A^{-1} и получим следующую систему $A^{-1}AX=A^{-1}f$. Введя обозначения $E=A^{-1}AX$ и $g=A^{-1}f$, можно записать $EX=g$, т.е.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \dots \\ g_n \end{bmatrix}.$$

Реализация метода Жордана–Гаусса происходит по следующим формулам:

$$\begin{aligned} c_{ij}^{(k)} &= c_{ij}^{(k-1)} - \frac{c_{kj}^{(k-1)}}{c_{kk}^{(k-1)}} c_{ik}^{(k-1)} \quad i, j \neq k; \\ c_{ij}^{(k)} &= \frac{c_{kj}^{(k-1)}}{c_{kk}^{(k-1)}} \quad i=k, j \neq k; \\ c_{ij}^{(k)} &= -\frac{c_{ik}^{(k-1)}}{c_{kk}^{(k-1)}} \quad i \neq k, j=k; \\ c_{ij}^{(k)} &= \frac{1}{c_{kk}^{(k-1)}} \quad i=k, j=k; \\ c_{ij}^{(0)} &= a_{ij} \quad i, j=1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (2.20)$$

2.3.2. Метод Гаусса с выбором главного элемента

В методе Гаусса (схема единственного деления) возможность проведения процесса исключения гарантируется условием неравенства нулю главных миноров матрицы A (условие Теорема об LU-разложении)

$$a_{11} \neq 0, \quad \det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \neq 0, \dots, \det(A) \neq 0.$$

Однако при вычислениях заранее неизвестно, все ли главные миноры матрицы A отличны от нуля. При этом может оказаться, что система (2.1) имеет единственное решение, несмотря на то, что какой-либо из главных миноров матрицы A равен нулю. Кроме того, фиксация ведущего элемента $a_{kk}^{(k-1)}$ в случае его относительной малости может привести в процессе вычислений к сильному накоплению погрешностей.

Например, имеем следующую систему уравнений:

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2.099 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 3.901 \\ 6 \end{bmatrix},$$

точным решением которой является вектор $X=[0,-1,1]$. Применим для решения этой системы метод Гаусса, вычисления будем проводить с пятью значащими цифрами. После двух шагов исключения придем к треугольной системе

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -0.001 & 6 \\ 0 & 0 & 15005 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 6.001 \\ 15004 \end{bmatrix}.$$

Применив к этой системе формулы обратного хода, получим следующее решение:

$$x_3 = 15004/15005 = 0.99993$$

$$x_2 = (6.001 - 6 * 0.99993) / (-0.0001) = -1.5$$

$$x_1 = [7 + 7 * (-1.5)] / 10 = -0.35$$

Таким образом, вместо $X=[0,-1,1]$ мы получили

$X^*=[-0.35,-1.5,0.99993]$. Большая потеря точности связана с выбором малого ведущего элемента $a_{22}^{(1)} = -0.001$ на втором шаге исключения.

Избежать таких ситуаций позволяет *метод Гаусса с выбором главного элемента*. Основная идея метода заключается в том, что в качестве ведущего элемента на каждом этапе исключения выбирается наибольший по модулю (главный) элемент. На практике обычно используются следующие варианты метода Гаусса с выбором главного элемента:

а) метод Гаусса с выбором главного элемента по строке. Ведущий элемент на k -ом шаге исключения выбирается как максимальный по модулю среди элементов k -ой строки, т.е. главный элемент строки $a_{kk}^{(k-1)}, a_{k,k+1}^{(k-1)}, \dots, a_{kn}^{(k-1)}$. Это равносильно перенумерации переменных на каждом этапе исключения.

б) метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу. Ведущий элемент на k -ом шаге исключения выбирается как главный элемент k -ого столбца, т.е. максимальный по модулю среди элементов $a_{k,k}^{(k-1)}, a_{k+1,k}^{(k-1)}, \dots, a_{n,k}^{(k-1)}$. Такой вариант метода Гаусса предусматривает перенумерацию уравнений на каждом этапе исключения.

в) метод Гаусса с выбором главного элемента по всей матрице. Ведущий элемент на k -ом шаге исключения выбирается как максимальный по модулю среди всех элементов $a_{i,j}^{(k-1)}$ $i,j=k, k+1, \dots, n$ неприведенной части матрицы, т.е. главный элемент по матрице. Такой

вариант предусматривает на каждом этапе исключения соответствующую перенумерацию переменных и перестановку уравнений.

Применим метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу к рассмотренному выше примеру.

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ -3 & 2.099 & 6 \\ 5 & -1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 3.901 \\ 6 \end{bmatrix}.$$

Решением является вектор: $x = \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}$.

Так как ведущий элемент первой строки $a_{11}=10$ является максимальным по модулю среди элементов первого столбца, то первый шаг исключения проводим как обычно. Получим

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & -0.001 & 6 \\ 0 & 2.5 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 6.001 \\ 2.5 \end{bmatrix}.$$

Главный элемент второго этапа исключения, т.е. по второму столбцу приведенной части матрицы, равен 2.5 и находится в третьем уравнении. Переставим 2-е и 3-е уравнения, переместив, таким образом, выбранный элемент на место ведущего

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & -0.001 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.001 \end{bmatrix}.$$

Проведем второй этап исключения

$$\begin{bmatrix} 10 & -7 & 0 \\ 0 & 2.5 & 5 \\ 0 & 0 & 6.002 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 2.5 \\ 6.002 \end{bmatrix}.$$

И теперь можем найти:

$$x_3 = 6.002/6.002 = 1$$

$$x_2 = (2.5 - 5 \cdot x_3) / 2.5 = -1$$

$$x_1 = [7 + 7 \cdot x_2] / 10 = 0$$

Полученное методом Гаусса с выбором главного элемента решение совпадает с точным.

2.4. Метод квадратного корня

Этот специальный метод предназначен для решения СЛАУ

$$AX=f \tag{2.21}$$

с симметричной (в комплексном случае эрмитовой) матрицей, т.е. $A=A^T > 0$ (положительно определенной). Такие системы возникают при

решении систем дифференциальных уравнений конечно-разностными методами или методом конечных элементов (МКЭ). В основе метода квадратного корня лежит следующая теорема.

Теорема. Пусть A симметричная матрица $A=A^T$, т.е. $a_{ij}=a_{ji}$ для всех $j, i=1, \dots, n$. Тогда справедливо разложение

$$A=S^TDS, \quad (2.22)$$

где D – диагональная матрица с элементами $d_{ii}=\pm 1, i=1, 2, \dots, n$; S – верхняя треугольная матрица ($s_{ij}=0, i>j$) с положительными элементами на главной диагонали, а S^T – сопряженная (транспонированная) к ней (нижняя треугольная) матрица). На основании теоремы о LU –разложении матрицы можно полагать также, что D – диагональная матрица с произвольными элементами, а S – верхняя треугольная матрица с единичной главной диагональю.

Следствие. Если матрица A симметричная, вещественная и положительно определенная $A>0$, тогда

$$A=S^TS \quad (2.23)$$

$$S = \begin{bmatrix} s_{11} & s_{12} & \dots & s_{1n} \\ 0 & s_{22} & \dots & s_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & s_{nn} \end{bmatrix} \quad S^T = \begin{bmatrix} s_{11} & 0 & \dots & 0 \\ s_{12} & s_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ s_{1n} & s_{2n} & \dots & s_{nn} \end{bmatrix}.$$

В силу положительной определенности матрицы [$A>0 \Leftrightarrow \forall X \neq 0$ скалярное произведение $(A,X)>0, X \in R^n$ – вектор,] элементы матрицы D положительны т.е. $D=E$ и, значит, можно записать $A=S^TS$.

Формулы метода квадратного корня несколько сложнее, чем в методе Гаусса. К тому же этот алгоритм может оказаться численно неустойчивым. Однако в двух случаях можно гарантировать устойчивость алгоритма – для положительно определенных матриц A и матриц с диагональным преобладанием.

Для положительной определенности матрицы необходимо и достаточно, чтобы все ее главные миноры были положительны. Это условие на практике проверить сложно. Обычно достаточно требования положительности диагональных элементов и их диагонального преобладания, т.е.

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1, \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad \forall i=1, 2, \dots, n.$$

Рассмотрим сначала случай симметричной положительно определенной матрицы A , т.е. для нее выполняется соотношение (2.23). Подставим (2.23) в уравнение (2.21) и введем обозначение $SX=Y$. В этом случае решение системы линейных алгебраических уравнений

(3.21) сводится к последовательному решению двух систем с треугольными матрицами

$$S^T Y = f \quad (2.24)$$

$$S X = Y \quad (2.25)$$

Т.к. матрица $S^T = \{s_{ij}^* = 0, j > i, i=1, 2, \dots, n; j=2, \dots, n\}$ системы (2.24) является нижней треугольной, т.е. система выглядит следующим образом

$$\begin{bmatrix} s_{11} & 0 & \dots & 0 \\ s_{12} & s_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ s_{1n} & s_{2n} & \dots & s_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \dots \\ y_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}, \text{ и можно сразу выписать ее решение}$$

шение

$$y_1 = \frac{f_1}{s_{11}}, \quad y_i = \frac{\left(f_i - \sum_{j=1}^{i-1} s_{ji} y_j \right)}{s_{ii}} \quad i=2, 3, \dots, n \quad (2.26)$$

Определив, таким образом, вектор Y , можем определить из системы (2.25) искомое решение. Это решение находим обратным ходом метода Гаусса, т.к. матрица S – верхняя треугольная. Имеем:

$$x_n = \frac{y_n}{s_{nn}}, \quad x_i = \frac{\left(y_i - \sum_{j=i+1}^n s_{ij} x_j \right)}{s_{ii}} \quad i=n-1, n-2, \dots, 1 \quad (2.27)$$

Вычисления по формулам (2.26), (2.27) требуют знания коэффициентов матрицы S . Их значения найдем из условия (2.23), т.е. $A = S^T S$.

Рассмотрим в качестве примера случай, когда матрица является квадратной матрицей второго порядка.

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}, \quad a_{11} > 0, \quad a_{22} > 0 \text{ и на основании (2.23) имеем:}$$

$$S^T = \begin{pmatrix} s_{11} & 0 \\ s_{12} & s_{22} \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} s_{11} & s_{12} \\ 0 & s_{22} \end{pmatrix}$$

$$S^T S = \begin{bmatrix} \underbrace{s_{11}^2} & s_{11}s_{12} \\ s_{12}s_{11} & \underbrace{s_{12}^2} + \underbrace{s_{22}^2} \end{bmatrix}.$$

Для выполнения условия (2.23) необходимо $a_{11} = (s_{11})^2, \quad a_{12} = s_{11}s_{12}, \quad a_{22} = (s_{12})^2 + (s_{22})^2.$

Из этой системы можем найти конкретное значение коэффициентов матрицы S .

$$s_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad s_{12} = \frac{a_{12}}{s_{11}}, \quad s_{22} = \sqrt{a_{22} - s_{12}^2}.$$

Рассуждая аналогичным образом для матрицы A произвольного порядка получим следующие соотношения:

$$\left. \begin{aligned} s_{11} &= \sqrt{a_{11}}, \quad s_{1j} = \frac{a_{1j}}{s_{11}}, \quad j = 2, 3, \dots, n \\ s_{ii} &= \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki}^2}, \quad i = 2, 3, \dots, n \\ s_{ij} &= \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki} s_{kj}}{s_{ii}}, \quad i < j, \quad i = 2, 3, \dots, j-1, \quad j = 2, \dots, n \end{aligned} \right\} \quad (2.28)$$

Таким образом, решение системы (2.21) методом квадратного корня предусматривает:

1. Вычисление по формулам (2.28) элементов s_{ij} матрицы S ;
2. По формулам (2.26) определение вектора Y ;
3. По формулам (2.27) вычисление искомого решения X .

В общем случае симметричной матрицы для вывода формул метода квадратного корня необходимо использовать соотношение (2.22). Формулы для определения коэффициентов матрицы S в этом случае будут следующими:

$$d_{ii} = \text{sign} \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki}^2 d_{kk} \right), \quad s_{ii} = \sqrt{\left| a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki}^2 d_{ii} \right|}, \quad i=j \quad (2.29)$$

$$s_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} s_{ki} s_{kj} d_{kk}}{s_{ii} d_{ii}}, \quad i < j, \quad i=2, 3, \dots, j-1, \quad j=2, \dots, n \quad (2.30)$$

Метод квадратного корня вдвое быстрее метода Гаусса (требует порядка $Q \sim N^3/3$ арифметических действий для поиска решения) и занимает вдвое меньше ячеек памяти, т.к. использует информацию о симметрии исходной матрицы. Эти преимущества ощутимы только при больших n , иначе он мало отличается по скорости от метода Гаусса, т.к. извлечение корня – медленная операция для выполнения на ЭВМ.

3. Вычисление определителей и обращение матрицы

3.1. Нахождение определителя

Непосредственное нахождение определителя требует большого объема вычислений. Вместе с тем известно, что легко вычисляется определитель треугольной матрицы: он равен произведению ее диагональных элементов.

Для приведения матрицы к треугольному виду может быть использован метод исключения, т.е. прямой ход метода Гаусса. Доказывается, что в процессе исключения элементов величина определителя не меняется.

Пусть имеем систему:

$$AX=f \quad (3.1)$$

и $\det A = D$. После деления левой и правой частей первого уравнения на a_{11} будем иметь, что определитель преобразованной системы

$$\det A^{(1)} = \frac{D}{a_{11}}.$$

Преобразования, связанные с исключением x_1 из остальных уравнений системы, величину определителя не меняют, т.е.

$$\det A^{(2)} = \frac{D}{a_{11}a_{22}^{(1)}} \text{ и т.д.}$$

Получив треугольную матрицу коэффициентов при неизвестных с единицами на главной диагонали, будем иметь,

$$\det A^{(n)} = 1. \text{ Следовательно } \frac{D}{a_{11}a_{22}^{(1)} \dots a_{nn}^{(n-1)}} = 1 \text{ и}$$

значит определитель матрицы A может вычисляться следующим образом $\det A = D = a_{11}a_{22}^{(1)} \dots a_{nn}^{(n-1)}$. Однако необходимо учесть, что при перестановке столбцов или строк знак определителя меняется на противоположный. Следовательно, окончательно значение определителя после приведения матрицы к треугольному виду будет вычисляться по формуле:

$$\det A = (-1)^\ell a_{11}a_{22}^{(1)}a_{33}^{(2)} \dots a_{nn}^{(n-1)}, \quad (3.2)$$

т.е. определитель матрицы A равен произведению ведущих элементов. Множитель $(-1)^\ell$ появляется в том случае, если использовался метод Гаусса с выбором главного элемента, где ℓ – сумма перестановок строк и столбцов, осуществляемых в процессе исключения.

Определитель матрицы, вычисляемый с помощью метода квадратного корня равен:

$$\det A = s_{11}^2 \cdot s_{22}^2 \cdot \dots \cdot s_{nn}^2. \quad (3.3)$$

3.2. Обращение матриц

Пусть A – невырожденная матрица n -го порядка. Нахождение матрицы, обратной данной матрице A , эквивалентно решению матричного уравнения:

$$AX = E, \quad (3.4)$$

где $X=A^{-1}$ – искомая матрица, E – единичная матрица n -го порядка.

Обозначим столбцы матрицы $A^{-1}=X$ как векторы-столбцы $X_{k,j}$ с фиксированным j – номером столбца. Тогда уравнение (3.1) можно записать в виде системы n^2 уравнений:

$$\sum_{k=1}^n a_{ik} x_{kj} = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \dots, n \quad (3.5)$$

где $\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$ – символ Кронекера. В развернутом виде

(3.5) выглядит следующим образом:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1n} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{n1} & x_{n2} & \dots & x_{nn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix}.$$

Для нахождения элементов одного столбца обратной матрицы нужно решить систему (3.5) с матрицей A и фиксированным номером столбца $-j$. Таким образом, нетрудно заметить, что система (3.5) распадается на n независимых систем линейных алгебраических уравнений с одной и той же матрицей A , но с различными правыми частями

$$AX^{(j)} = \delta^{(j)}; \quad j = 1, 2, \dots, n \quad (3.6)$$

$$X \circlearrowleft = \begin{bmatrix} x_{1i} \\ x_{2i} \\ \vdots \\ x_{ni} \end{bmatrix}; \quad \delta \circlearrowleft = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad j\text{-ая компонента, т.е. имеем}$$

при

$$j=1 \quad \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{11} \\ x_{21} \\ \dots \\ x_{n1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$j=2 \quad \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{12} \\ x_{22} \\ \dots \\ x_{n2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Полученные системы (3.6) можно решать одновременно методом Гаусса. При этом, т.к. все системы имеют одну и ту же матрицу A , достаточно один раз совершить прямой ход. Но для каждой системы (3.6) делается обратный ход.

Рассмотрим пример.

$$A = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 3 \\ 1 & 4 & 2 \\ 3 & 2 & 6 \end{bmatrix} \quad A^{-1} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & -1 \\ 0 & 0.3 & -0.1 \\ -1 & -0.1 & 0.7 \end{bmatrix} \quad E = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

A – исходная.

$$M = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 2 & 1 & 3 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 6 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad \text{– объединили с } E.$$

$$M^{(1)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0.5 & 1.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 1 & 4 & 2 & 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 6 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad \text{– разделили на } m_{11}=2$$

$$M^{(2)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0.5 & 1.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 3.5 & 0.5 & -0.5 & 1 & 0 \\ 0 & 0.5 & 1.5 & -1.5 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad \text{– исключили } x_1 \text{ из второго и}$$

третьего уравнений, для этого

а) из второго вычтем первое;

б) из третьего вычтем первое, умноженное на -3 :

$$M^{(3)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0.5 & 1.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0.143 & -0.143 & 0.286 & 0 \\ 0 & 0.5 & 1.5 & -1.5 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad \text{– получили 1 на } m_{22},$$

разделив на значение $m_{22}=3.5$

$$M^{(4)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0.5 & 1.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0.143 & -0.143 & 0.286 & 0 \\ 0 & 0 & 1.429 & -1.429 & -0.143 & 1 \end{array} \right] \quad \text{– исключили } x_2 \text{ из}$$

третьего уравнения:

$$M^{(5)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0.5 & 1.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0.143 & -0.143 & 0.286 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -0.1 & 0.7 \end{array} \right] \text{ -- получили 1 при } x_3.$$

Обратный ход:

$$M^{(6)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0.5 & 1.5 & 0.5 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0.3 & -0.1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -0.1 & 0.7 \end{array} \right] \text{ -- ноль для } x_3 \text{ во втором}$$

уравнении, т.е. третье уравнение умножить на -0,143 и сложить со вторым.

$$M^{(7)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0.5 & 0 & 2 & 0.15 & -1.05 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0.3 & -0.1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -0.1 & 0.7 \end{array} \right] \text{ -- ноль для } x_3 \text{ в первом}$$

уравнении.

$$M^{(8)} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1 & 0 & 0 & 2 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0.3 & -0.1 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -0.1 & 0.7 \end{array} \right] \text{ -- ноль для } x_2 \text{ в первом}$$

уравнении.

Для обращения матрицы весьма эффективным является метод Жордана. Для вычисления матрицы C , обратной матрице A , использованы следующие рекуррентные соотношения $i, j, k = 1, 2, \dots, n$.

При $(i \neq k), (j \neq k)$

$$c_{ij}^{(k)} = \left[c_{ij}^{(k-1)} - c_{kj}^{(k-1)} \frac{c_{ik}^{(k-1)}}{c_{kk}^{(k-1)}} \right].$$

При $(i = k), (j \neq k)$

$$c_{ij}^{(k)} = \frac{c_{ik}^{(k-1)}}{c_{kk}^{(k-1)}}.$$

При $(i \neq k), (j = k)$

$$c_{ij}^{(k)} = \frac{-c_{ik}^{(k-1)}}{c_{kk}^{(k-1)}}.$$

При $(i = k), (j = k)$

$$c_{ij}^{(k)} = \frac{1}{c_{kk}^{(k-1)}} \text{ полагаем } c_{ij}^{(0)} = a_{i,j}. \text{ Тогда } C^{(n)} = A^{-1}.$$

Сравнивая (4.5) и (4.7), можем записать, что для $i=2, 3, \dots, n-1$

$$A_i = \frac{-c_i}{a_i A_{i-1} + b_i}, \quad B_i = \frac{f_i - a_i B_{i-1}}{a_i A_{i-1} + b_i}. \quad (4.8)$$

Соотношения (4.8) представляют собой рекуррентные нелинейные уравнения относительно A_i, B_i . Для их решения необходимо задать начальные значения A_1, B_1 . Из первого уравнения системы (4.4) имеем

$$x_1 = -\frac{c_1}{b_1} x_2 + \frac{f_1}{b_1}. \quad (4.9)$$

С другой стороны, по формуле $x_1 = A_1 x_2 + B_1$, поэтому можем записать, что

$$A_1 = -\frac{c_1}{b_1}, \quad B_1 = \frac{f_1}{b_1}. \quad (4.10)$$

Нахождение коэффициентов A_i, B_i , называемых прогоночными, по формулам (4.8), (4.10) называется прямой проголкой. После того как прогоночные коэффициенты $A_i, B_i, i=2, 3, \dots, n-1$ найдены из системы (4.8), решение системы (4.4) находится по рекуррентной формуле (4.7). Но для начала счета необходимо определить x_n . Для этого воспользуемся последним уравнением (4.4) и уравнением (4.5) при $i=n-1$. Запишем их:

$$\begin{aligned} a_n x_{n-1} + b_n x_n &= f_n \\ x_{n-1} &= A_{n-1} x_n + B_{n-1}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

откуда следует, что

$$x_n = \frac{f_n - a_n B_{n-1}}{b_n + a_n A_{n-1}}. \quad (4.12)$$

Используя формулы (4.5) и выражения для прогоночных коэффициентов (4.8), (4.10), последовательно определяем все неизвестные системы (4.4). Вычисление x_i называется обратной проголкой, а сам рассмотренный двухэтапный метод – методом проголки или просто проголкой.

Нетрудно установить связь метода проголки с методом Гаусса (методом последовательного исключения неизвестных).

При описании метода проголки предполагалась возможность выполнения всех предписанных алгоритмом действий. Однако необходимо определить условия, при которых алгоритм действительно выполним, т.е. указать обоснование метода проголки. Реально это означает, что должно отсутствовать деление на ноль в формулах (4.8), (4.10) и выполняться устойчивость метода (влияние погрешности в задании входных данных на полученное методом проголки решение).

Теорема. Пусть коэффициенты системы (4.4) удовлетворяют условиям

$$a_i \neq 0, \quad c_i \neq 0, \quad |b_i| \geq |a_i| + |c_i|, \quad i=2, \dots, n-1. \quad (4.13)$$

$$|b_1| \geq |c_1|, \quad |b_n| \geq |a_n|, \quad (4.14)$$

причем хотя бы в одном неравенстве (4.13) или (4.14) выполняется строгое неравенство, т.е. матрица A имеет диагональное преобладание. Тогда для алгоритма метода прогонки имеют место неравенства

$$(a_i A_{i-1} + b_i) \neq 0 \quad i=2, \dots, n \quad |A_i| \leq 1, \quad i=1, 2, \dots, n-1, \quad (4.15)$$

которые обеспечивают корректность и устойчивость метода.

Условие диагонального преобладания элементов является достаточным, но не является необходимым. В ряде случаев для хорошо обусловленных систем метод прогонки оказывается устойчивым даже при нарушении условия диагонального преобладания элементов.

Рассмотренный метод (4.5), (4.8), (4.10), (4.12) называется правой прогонкой. В этом случае определение неизвестных происходит в направлении убывания индексов. Аналогично выводятся формулы левой прогонки. В этом алгоритме значения неизвестных x_i находятся в направлении возрастания индексов.

$$A_n^* = -\frac{a_n}{b_n}, \quad B_n^* = \frac{f_n}{b_n}, \quad (4.16)$$

$$A_{i-1}^* = \frac{-a_i}{c_i A_i^* + b_i}, \quad B_{i-1}^* = \frac{f_i - c_i B_i^*}{c_i A_i^* + b_i} \quad (4.17)$$

$$i=n-1, n-2, \dots, 1$$

$$x_1 = \frac{f_1 - b_1 B_1^*}{c_1 A_1^* + b_1}, \quad (4.18)$$

$$x_{i+1} = A_i^* x_i + B_i^*, \quad i=3, \dots, n-1 \quad (4.19)$$

Левая прогонка применяется, если $|b_n| \geq |a_n|$. Комбинация левой и правой прогонок даст метод *встречных прогонок*. Если задача не обладает свойством диагонального преобладания элементов, то для ее решения используют методы *немонотонной* или *ортогональной прогонки*.

5. Итерационные методы решения СЛАУ

5.1 Общая характеристика итерационных методов решения СЛАУ

Имеем систему линейных алгебраических уравнений (1.2)

Будем искать решение этой задачи с помощью итерационных методов. Общая идея итерационных методов состоит в том, что в процессе реализации метода вычисляется не само решение задачи (1), а

некоторая сходящаяся последовательность векторов $\mathbf{X}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$, $k=0, 1, 2, \dots$ (Число k называют номером итерации). Предел этой последовательности \mathbf{X} и будет искомым решением задачи (1.2), т.е. должно выполняться соотношение

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}\| = 0 \quad \text{при } k \rightarrow \infty. \quad (5.1)$$

Определение. Последовательность $\mathbf{X}^{(k)} = (x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})$ называется сходящейся, если существует n конечных пределов $x_i = \lim_{k \rightarrow \infty} x_i^{(k)}$, $i=1, 2, \dots, n$, $k=0, 1, 2, \dots$. Вектор $\mathbf{X} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$ называют пределом последовательности $\mathbf{X}^{(k)}$.

В соотношении (5.1) используется понятие нормы (норма – это положительное число, удовлетворяющее нескольким аксиомам). При рассмотрении теорем, которые определяют условия сходимости итерационных методов, будут использоваться нормы матриц, согласованные с данными нормами векторов.

Определение. Норма матрицы согласована с данной нормой векторов, если для любой квадратной матрицы A и для любого вектора X , размерность которого равна порядку матрицы, выполняется неравенство $\|AX\| \leq \|A\| \|X\|$.

Если среди всех согласованных норм взять наименьшую, то эта норма называется *подчиненной* данной норме вектора.

Укажем представление норм матриц, подчиненных введенным ранее нормам векторов для

- 1) первая (кубическая) норма вектора $\|X\|_1 = \max |X_i|$, $1 \leq i \leq n$. Подчиненной будет первая норма матрицы

$$\|A\|_1 = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|, \quad 1 \leq i \leq n - \text{максимум из сумм модулей элементов строки.}$$

- 2) вторая (октаэдрическая) норма вектора $\|X\|_2 = \sum |X_i|$, $i=1, \dots, n$. Подчиненной будет

$$\|A\|_2 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|, \quad 1 \leq j \leq n - \text{максимум из сумм модулей элементов столбца.}$$

- 3) третья (сферическая, иначе – среднеквадратичная) норма вектора $\|X\|_3 = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2} = \left(\sum_{i=1}^n X_i^2 \right)^{1/2}$, $i=1, \dots, n$. Подчиненной будет третья норма матрицы

$$\|A\|_3 = \sqrt{\lambda}, \quad \text{где } \lambda - \text{наибольшее собственное значение матрицы } A.$$

Любой итерационный метод – это циклический процесс, каждый цикл которого представляет собой одну итерацию для получения нового значения последовательности $\mathbf{X}^{(k)}$, $k=0, 1, 2, \dots$, являющейся

приближением вектора решения \mathbf{X} . Следовательно, для начала вычислений необходимо задавать как минимум один вектор начального приближения $\mathbf{X}^{(0)}$. Условия и скорость сходимости каждого итерационного метода решения задачи (1) существенно зависят от свойств матрицы \mathbf{A} и выбора начальных приближений.

Исходя из того, что один и тот же итерационный метод может быть записан различными способами, для исследования итерационных методов очень важно иметь возможность их записи в единой или канонической форме. Наиболее простыми для использования являются двухслойные (одношаговые) итерационные методы. В этих методах для нахождения нового значения вектора приближений используется только одна итерация, т.е. $\mathbf{X}^{(k+1)} \sim \Phi(\mathbf{X}^{(k)})$, $\mathbf{X}^{(k)}$ – известное значение. Если же для нахождения $\mathbf{X}^{(k+1)}$ необходимо знать значения на двух предыдущих итерациях $\mathbf{X}^{(k-1)}$, $\mathbf{X}^{(k)}$, то метод называется двухшаговым (или трехслойным) и т.д.

Любой двухслойный итерационный метод принято записывать в следующей канонической форме

$$\mathbf{B} \frac{\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}}{\tau_{k+1}} + \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{f}, \quad k=0, 1, 2, \dots \quad (5.2)$$

Здесь \mathbf{B} – вещественная невырожденная матрица порядка $n \times n$, \mathbf{A} – квадратная матрица $n \times n$ исходного уравнения (1), $\mathbf{f} = (f_1, \dots, f_n)^T$ – заданный вектор столбец с вещественными компонентами, $\mathbf{X}^{(k+1)}$, $\mathbf{X}^{(k)}$ – итерационные приближения искомого вектора \mathbf{X} , $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_{k+1}$ – последовательность положительных итерационных параметров ($\tau_i > 0$), k – номер итерации. Начальное приближение $\mathbf{X}^{(0)}$ предполагается произвольным.

Если в (5.2) итерационный параметр $\tau_{k+1} = \tau$ не зависит от номера итерации, то такой процесс (метод) называется стационарным.

Чтобы задача (2.1) имела решение, последовательность векторов $\mathbf{X}^{(k)}$ должна быть сходящейся к решению задачи (2.1), поэтому параметры \mathbf{B} и τ_{k+1} нужно выбирать таким образом, чтобы обеспечивать сходимость последовательности $\mathbf{X}^{(k)}$. С другой стороны, если выразить $\mathbf{X}^{(k+1)}$ из (5.2), то потребуются процедура обращения матрицы \mathbf{B} . Задача обращения матрицы \mathbf{B} должна быть существенно более простой, чем задача нахождения матрицы \mathbf{A}^{-1} , иначе не имеет смысла строить итерационный процесс (5.2).

Как правило, для любого численного итерационного метода решения задачи (2.1) сходимость к точному решению за конечное число итераций не достигается. Обычно задается некоторое малое число $\varepsilon > 0$, которое называется требуемой точностью, и вычисления необходимо проводить до тех пор, пока не выполнится условие

$$\|\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}\| \leq \varepsilon. \quad (5.3)$$

Итерационное приближение $\mathbf{X}^{(k)}$, удовлетворяющее этому условию, считается приближенным решением системы (2.1) с заданной точностью ε . Поскольку вектор точного решения \mathbf{X} – неизвестный вектор, то число итераций $\mathbf{k}(\varepsilon)$, необходимое для получения решения с заданной точностью, т.е. выполнения оценки (5.3), теоретически сложно определить. В тех случаях, когда сделать это не удастся, применяют нестрогие критерии окончания итерационного процесса:

$$\|\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}\| \leq \varepsilon, \quad (5.4)$$

т.е. процесс прекращается, если на двух последовательных итерациях значения векторов приближений различаются не более, чем в пределах заданной точности. Если используется понятие невязки, то условие окончания итерационного процесса будет выглядеть так

$$\|\mathbf{r}^{(k+1)} - \mathbf{r}^{(k)}\| \leq \varepsilon, \quad (5.5)$$

где $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{f}$ – невязка системы (2.1) на приближенном решении $\mathbf{X}^{(k)}$. Составляющие вектора невязки вычисляются по формулам:

$$r_i^{(k)} = \sum_{j=1}^n a_{ij}x_j^{(k)} - f_j, \quad i=1, 2, \dots, n. \quad (5.6)$$

Одной из важнейших характеристик итерационного процесса (5.2) является $\mathbf{k}(\varepsilon)$ – число итераций, которое необходимо для достижения решения с заданной точностью. Минимальное количество итераций, достаточное для того, чтобы начальная погрешность $\|\mathbf{X}^{(0)} - \mathbf{X}\|$ уменьшилась в заданное число раз, можно определить как $\mathbf{k}_0(\varepsilon)$. Число $\mathbf{k}(\varepsilon)$ итераций должно обеспечивать выполнение следующего неравенства

$$\|\mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}\| \leq \varepsilon \|\mathbf{X}^{(0)} - \mathbf{X}\|, \quad (5.7)$$

с $\mathbf{k}(\varepsilon)$ связано число $\mathbf{Q}(\varepsilon)$, характеризующее общий объем вычислений. Величина $\mathbf{Q}(\varepsilon)$ связана с \mathbf{Q}_m – числом действий для вычисления одного вектора приближений $\mathbf{X}^{(m)}$ следующим соотношением:

$$\mathbf{Q}(\varepsilon) = \sum_{m=1}^{k(\varepsilon)} \mathbf{Q}_m. \quad \text{Задача построения экономичного итерационного про-}$$

цесса решения системы (2.1) будет заключаться в минимизации чисел \mathbf{Q}_m и $\mathbf{k}(\varepsilon)$. Минимизация объема вычислений для нахождения одного приближения вектора решения с заданной точностью, т.е. числа \mathbf{Q}_m , осуществляется за счет выбора соответствующей матрицы \mathbf{B} . Минимизация же числа итераций, необходимого для достижения заданной точности, – как за счет выбора \mathbf{B} , так и за счет выбора τ_{k+1} .

Рассмотрим вопрос сходимости итерационных методов. Погрешностью метода на k -ой итерации называется вектор

$$\mathbf{Z}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}, \quad (5.8)$$

который является решением однородной задачи

$$\mathbf{B} \frac{\mathbf{Z}^{(k+1)} - \mathbf{Z}^{(k)}}{\tau_{k+1}} + \mathbf{A} \mathbf{Z}^{(k)} = 0, \quad k=0,1,2,\dots \quad \mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{X}^{(0)} - \mathbf{X} \quad (5.9)$$

Задача (5.9) – это результат подстановки соотношения (5.8) в уравнение (2.1). Разрешая уравнение (5.9) относительно $\mathbf{Z}^{(k+1)}$, получаем

$$\mathbf{Z}^{(k+1)} = (\mathbf{E} - \tau_{k+1} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A}) \mathbf{Z}^{(k)} = \mathbf{S}_k \mathbf{Z}^{(k)}. \quad (5.10)$$

При этом

$$\mathbf{Z}^{(k)} = \mathbf{S}_{k-1} \dots \mathbf{S}_0 \mathbf{Z}^{(0)} = \mathbf{T}_{k,0} \mathbf{Z}^{(0)}. \quad (5.11)$$

Матрица \mathbf{S}_k называется матрицей перехода от k -ой итерации к $(k+1)$ -ой, а $\mathbf{T}_{k,0}$ – разрешающей матрицей. Если рассматривать стационарный, т.е. $\tau_{k+1} = \text{const}$, итерационный процесс (5.4) для симметричной матрицы $\mathbf{A} = \mathbf{A}^*$, то $\mathbf{S}_0 = \mathbf{S}_1 = \dots = \mathbf{S}_{k-1} \equiv \mathbf{S} = \mathbf{S}^*$ и

$$\|\mathbf{T}_{k,0}\| = \|\mathbf{S}^k\| = \|\mathbf{S}\|^k. \quad (5.12)$$

Соотношение (5.12) позволяет оценить число $\mathbf{k}(\epsilon)$. Так как условие (5.7) будет выполнено, если

$$\|\mathbf{S}^k\| \leq \epsilon. \quad (5.13)$$

Прологарифмируем это соотношение (5.13), проведем элементарные преобразования и получим

$$\mathbf{k}(\epsilon) \geq \frac{\ln(1/\epsilon)}{\ln(1/\|\mathbf{S}\|)}. \quad (5.14)$$

Величину $\ln(1/\|\mathbf{S}\|)$ называют скоростью сходимости итерационного метода.

Далее будем рассматривать стационарные итерационные методы, для которых $\mathbf{Z}^{(k)} = \mathbf{S}^k \mathbf{Z}^{(0)}$.

Теорема. Для сходимости стационарного ($\tau_{k+1} = \tau$) итерационного процесса (5.2) необходимо и достаточно, чтобы все собственные значения матрицы $\mathbf{S} = (\mathbf{E} - \tau \mathbf{B}^{-1} \mathbf{A})$ были по модулю меньше единицы (без доказательства).

В отличие от прямых методов решения СЛАУ итерационные методы могут применяться и в случаях больших систем, размерность которых порядка $10^6 - 10^7$. Основными проблемами построения и использования итерационных методов являются:

- 1) создание алгоритма построения векторов итерационной последовательности $\mathbf{X}^{(0)}, \mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(k)}, \dots$ сходящейся к решению системы (2.1);
- 2) определение условия сходимости построенной итерационной последовательности $\mathbf{X}^{(0)}, \mathbf{X}^{(1)}, \dots, \mathbf{X}^{(k)}, \dots$;
- 3) оценка погрешности итерационного решения;
- 4) требование экономичности алгоритма, т.е. достижение заданной точности за минимальное число итераций и с минимальными затратами машинного времени.

$$k(\varepsilon) = \left\lceil \frac{\ln \left(\frac{\varepsilon}{\|X^{(0)}\| + \frac{\|g\|}{1 - \|B\|}} \right)}{\ln \|B\|} \right\rceil + 1 \quad (5.25)$$

Если в качестве начального приближения выбран столбец g , то

$$k(\varepsilon) = \left\lceil \frac{\ln \left(\frac{\varepsilon \|B\|}{\|g\|} \right)}{\ln \|B\|} \right\rceil + 1, \quad (5.26)$$

где $\lceil \cdot \rceil$ – это целая часть числа.

Таким образом выбор матрицы B для системы (5.16) метода простой итерации должен подчиняться требованиям сходимости (5.22). Наиболее просто этот вопрос решается в случае, когда матрица A обладает свойством диагонального преобладания, т.е. ее элементы удовлетворяют неравенствам:

$$|a_{ii}| > \sum_{j \neq i}^n |a_{ij}|, \quad i=1, 2, \dots, n \quad (5.27)$$

В этом случае систему (5.15) в каноническом виде (5.16) естественно записать следующим образом:

$$x_i = - \sum_{j \neq i}^n \left(|a_{ij}| \frac{x_j}{|a_{ii}|} \right) + \frac{f_i}{|a_{ii}|}, \quad i=1, 2, \dots, n \quad (5.28)$$

т.е.

$$b_{ii} = 0, \quad \text{при } j \neq i \quad b_{ij} = - \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|}, \quad g_i = \frac{f_i}{|a_{ii}|} \quad (5.29)$$

Вычислим норму такой матрицы B с учетом (12):

$$\|B\| = \max_i \sum_j |b_{ij}| = \max_i \frac{\sum_j |a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1, \quad i=1, \dots, n \quad (5.30)$$

Достаточный признак сходимости гарантирует в этом случае сходимость метода простой итерации (5.20) при любом начальном приближении $X^{(0)}$.

Пример. Применить метод простых итераций для решения следующей СЛАУ с точностью $\varepsilon=10^{-3}$

$$\begin{cases} 4x_1 + 0.24x_2 - 0.08x_3 = 8 & | \text{разделим на } a_{11} = 4 \\ 0.09x_1 + 3x_2 - 0.15x_3 = 9 & | \text{разделим на } a_{22} = 3 \\ 0.04x_1 - 0.084x_2 + 4x_3 = 20 & | \text{разделим на } a_{33} = 4. \end{cases}$$

Очевидно, что матрица A этой системы удовлетворяет условиям диагонального преобладания, поэтому получим канонический вид (5.16) для данной системы:

$$\begin{cases} x_1 = -0.06x_2 + 0.02x_3 + 2 \\ x_2 = -0.03x_1 + 0.05x_3 + 3 \\ x_3 = -0.01x_2 + 0.02x_2 + 5. \end{cases}$$

Вычисление итерационной последовательности векторов осуществим по методу простой итерации

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -0.06x_2^{(k)} + 0.02x_3^{(k)} + 2 \\ x_2^{(k+1)} = -0.03x_1^{(k)} + 0.05x_3^{(k)} + 3 \\ x_3^{(k+1)} = -0.01x_2^{(k)} + 0.02x_2^{(k)} + 5 \end{cases} \quad k=0, 1, 2, \dots$$

Т.к. выполняется достаточный признак сходимости, то этот итерационный алгоритм сходится. Выберем начальное приближение $X^{(0)} = g$ и найдем $k(\varepsilon)$ – количество итераций, которое понадобится для обеспечения точности ε . Для этого воспользуемся формулой

$$k(\varepsilon) = \left\lceil \frac{\ln\left(\frac{\varepsilon \|\mathbf{B}\|}{\|\mathbf{g}\|}\right)}{\ln\|\mathbf{B}\|} \right\rceil + 1 \quad (5.31)$$

Возьмем согласованные нормы

$$\|\mathbf{B}\|_1 = \max_j \sum_i |b_{ij}| \quad \text{и} \quad \|\mathbf{X}\|_1 = \max |X_i|, \quad 1 \leq i \leq n;$$

$$\|\mathbf{B}\|_1 = \max\{0.06+0.02; 0.03+0.05; 0.01+0.02\} = 0.008 < 1$$

$$\|\mathbf{g}\|_1 = \max\{2; 3; 5\} = 5$$

$$k(\varepsilon) = \left\lceil \frac{\ln\left(\frac{10^{-3} \cdot 0.08}{5}\right)}{\ln 0.08} \right\rceil + 1 = 4$$

$$\begin{cases} x_1^1 = -0.06x_2^{(0)} + 0.02x_3^{(0)} + 2 \\ x_2^1 = -0.03x_1^{(0)} + 0.05x_3^{(0)} + 3, \\ x_3^1 = -0.01x_1^{(0)} + 0.02x_2^{(0)} + 5 \end{cases}$$

$$X^{(0)} = g = \begin{bmatrix} 2 \\ 3 \\ 5 \end{bmatrix} \text{ имеем}$$

$$\begin{cases} x_1^1 = -0.06 \cdot 3 + 0.02 \cdot 5 + 2 = 1.92 \\ x_2^1 = -0.03 \cdot 2 + 0.05 \cdot 5 + 3 = 3.19. \\ x_3^1 = -0.01 \cdot 2 + 0.02 \cdot 3 + 5 = 5.04 \end{cases}$$

Следующее приближение $X^{(2)} = (1,909; 3,1944; 5,0446)^T$. После третьей итерации имеем $X^{(3)} = (1,909; 3,194; 5,0447)^T$.

Рассмотрим еще один пример.

$$\begin{cases} 3.8x_1 + 6.7x_2 - 1.2x_3 = 5.2 & | \text{ умножим на } \alpha \\ 6.4x_1 + 1.3x_2 - 2.7x_3 = 3.8 & | \text{ умножим на } \beta \\ 2.4x_1 - 45x_2 + 3.5x_3 = -0.6 & | \text{ умножим на } \gamma \end{cases}$$

Добьемся диагонального преобладания в этой системе. Для этого умножим первое уравнение на параметр α , второе – на β , третье – на γ и сложим эти уравнения. Имеем $(3.8\alpha + 6.4\beta + 2.4\gamma)x_1 + (6.7\alpha + 1.3\beta - 4.5\gamma)x_2 - (1.2\alpha + 2.7\beta - 3.5\gamma)x_3 = 5.2\alpha + 3.8\beta - 0.6\gamma$.

Параметры α , β , γ выбираем таким образом, чтобы последовательно доминировали коэффициенты при x_1 , x_2 , x_3 .

$$1) \alpha = \beta = 1, \quad \gamma = 1.5$$

$$\mathbf{13.8x_1 + 1.25x_2 + 1.35x_3 = 8.1}$$

$$2) \alpha = -1.7, \quad \beta = 1, \quad \gamma = 0$$

$$\mathbf{0.06x_1 + 10.09x_2 + 0.66x_3 = 5.04}$$

$$3) \alpha = 1, \quad \beta = -1.2, \quad \gamma = 5$$

$$\mathbf{0.28x_1 + 1.61x_2 + 7.29x_3 = 0.26.}$$

Таким образом, исходная система преобразована к эквивалентной системе, матрица которой имеет диагональное преобладание.

$$\mathbf{13.8x_1 + 1.25x_2 + 1.35x_3 = 8.1}$$

$$\mathbf{0.06x_1 + 10.09x_2 + 0.66x_3 = 5.04}$$

$$\mathbf{0.28x_1 + 1.61x_2 + 7.29x_3 = 0.26}$$

Теперь можно для поиска решения системы применить метод простой итерации, поступая как в предыдущем примере.

5.3. Метод Зейделя

Метод Зейделя, как и метод простых итераций, является итерационным методом решения системы линейных алгебраических уравнений.

Метод Зейделя обладает более высокой скоростью сходимости, чем метод простых итераций, т.е. для получения решения с заданной точностью он требует меньшего числа итераций, а следовательно, и меньших затрат машинного времени.

Первые два этапа метода Зейделя являются такими же, как в методе простой итерации, т.е.

1. Сначала система (5.15) приводится к каноническому виду

$$\mathbf{X} = \mathbf{B}\mathbf{X} + \mathbf{g} \quad (5.32)$$

или

$$x_i = \sum_{j=1}^n b_{ij} x_j + g_i, \quad i=1, 2, \dots, n, \quad (5.33)$$

где матрица

$$\mathbf{B} = \{b_{ij}\} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \dots & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \dots & b_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ b_{n1} & b_{n2} & \dots & b_{nn} \end{bmatrix} \quad \mathbf{g} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \dots \\ g_n \end{bmatrix}.$$

Проверяется условие сходимости метода.

2. Затем выбирается каким-либо образом вектор начального приближения

$$\mathbf{X}^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)})^T. \quad (5.34)$$

3. Метод отличается способом построения итерационной последовательности $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \dots, \mathbf{X}^{(k)}, \dots$. В методе Зейделя последовательность итерационных приближений строится по правилу

$$x_i^{(k+1)} = \sum_{j=1}^{i-1} b_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i}^n b_{ij} x_j^{(k)} + g_i, \quad i=1, 2, \dots, n \quad (5.35)$$

т.е.

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = b_{11}x_1^{(k)} + b_{12}x_2^{(k)} + \dots + b_{1n-1}x_{n-1}^{(k)} + b_{1n}x_n^{(k)} + g_1 \\ x_2^{(k+1)} = b_{21}x_1^{(k+1)} + b_{22}x_2^{(k)} + \dots + b_{2n-1}x_{n-1}^{(k)} + b_{2n}x_n^{(k)} + g_2 \\ \dots \\ x_n^{(k+1)} = b_{n1}x_1^{(k+1)} + b_{n2}x_2^{(k+1)} + \dots + b_{nn-1}x_{n-1}^{(k+1)} + b_{nn}x_n^{(k)} + g_n \end{cases} \quad (5.36)$$

или в матричном виде

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{L}\mathbf{X}^{(k+1)} + (\mathbf{R} + \mathbf{D})\mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{g}, \quad k=0, 1, 2, \dots, \quad (5.37)$$

где $\mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{R} = \mathbf{B}$ и при этом \mathbf{L} – нижняя, \mathbf{R} – верхняя треугольные матрицы. Матрица \mathbf{D} – диагональная, с той же диагональю, что и матрица \mathbf{B} .

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \mathbf{b}_{21} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \mathbf{b}_{n1} & \mathbf{b}_{n2} & \dots & \mathbf{b}_{nn-1} & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{b}_{12} & \dots & \mathbf{b}_{1n} \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{b}_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \mathbf{b}_{n-1n} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} \mathbf{b}_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathbf{b}_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{b}_{nn} \end{pmatrix}.$$

Соотношение (5.37) можно переписать следующим образом

$$(\mathbf{E}-\mathbf{L})\mathbf{X}^{(k+1)} = (\mathbf{R}+\mathbf{D})\mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{g}, \quad k=0, 1, 2, \dots \quad (5.38)$$

Так как $\det(\mathbf{E}-\mathbf{L})=1$ (эта матрица треугольная, а на диагонали стоят только единицы), то существует обратная матрица $(\mathbf{E}-\mathbf{L})^{-1}$. Следовательно (5.38) преобразуем следующим образом

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = (\mathbf{E}-\mathbf{L})^{-1}(\mathbf{R}+\mathbf{D})\mathbf{X}^{(k)} + (\mathbf{E}-\mathbf{L})^{-1} \cdot \mathbf{g} \quad k=0,1,2,\dots \quad (5.39)$$

Поэтому метод Зейделя можно трактовать как разновидность метода простой итерации

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{H}\mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{p}, \quad k=0,1, 2, \dots \quad (5.40)$$

где $\mathbf{H}=(\mathbf{E}-\mathbf{L})^{-1}(\mathbf{R}+\mathbf{D})$, $\mathbf{p}=(\mathbf{E}-\mathbf{L})^{-1} \cdot \mathbf{g}$. Следовательно, можно сформулировать условия сходимости метода Зейделя.

Критерий сходимости метода Зейделя (необходимое и достаточное условие). Для того, чтобы метод Зейделя (5.35) или (5.37) сошелся при любом выборе начального приближения $\mathbf{X}^{(0)}$, необходимо и достаточно, чтобы все собственные значения матрицы

$\mathbf{H}=(\mathbf{E}-\mathbf{L})^{-1}(\mathbf{R}+\mathbf{D})$ были по модулю меньше единицы. Это утверждение эквивалентно требованию, чтобы все корни характеристического уравнения

$$\det(\lambda\mathbf{E}-\mathbf{H})=0, \quad \text{т.е.} \quad \det(\lambda\mathbf{E}-(\mathbf{E}-\mathbf{L})^{-1}(\mathbf{R}+\mathbf{D}))=0 \quad (5.41)$$

были по модулю меньше единицы.

Однако для практики эта теорема слишком трудоемка, поэтому обычно используют достаточные признаки сходимости.

Первый достаточный признак сходимости метода Зейделя.

Чтобы метод Зейделя сошелся достаточно, чтобы первая или вторая нормы матрицы \mathbf{B} удовлетворяли условию:

$$\|\mathbf{B}\|_I = \max \sum_{j=1}^n |\mathbf{b}_{ij}| < 1, \quad 1 \leq i \leq n \quad (5.42)$$

$$\|\mathbf{B}\|_{II} = \max \sum_{i=1}^n |\mathbf{b}_{ij}| < 1, \quad 1 \leq j \leq n$$

(максимум из сумм модулей элементов строки, столбца должен быть меньше единицы).

Второй достаточный признак сходимости метода Зейделя.

Если

$$\| \mathbf{B} \| = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| \leq 1, \quad (5.43)$$

но хотя бы для одного $i=i^*$ выполняется строгое неравенство

$$\sum_{j=1}^n |b_{i^*j}| < 1, \quad (5.44)$$

то метод Зейделя сходится.

Третий достаточный признак сходимости метода Зейделя.

Если матрица A уравнения (5.15) является симметричной ($A=A^T$) и положительно определенной ($A>0$), то метод Зейделя сходится при любом начальном приближении.

Хотя метод Зейделя можно рассматривать как метод простой итерации, однако, эти методы:

1) имеют неодинаковые области сходимости, т.е. существуют системы вида (5.15), для которых метод простой итерации будет сходиться, а метод Зейделя – нет, и наоборот;

2) если для одной и той же системы (5.15) метод простой итерации и метод Зейделя сходятся, то предпочтительнее использовать метод Зейделя, т.к. он сходится быстрее. При этом для метода Зейделя требуется в два раза меньший объем памяти.

Рассмотрим пример. Методом Зейделя решить систему уравнений

$$\begin{cases} 4x_1 - x_2 + x_3 = 4 \\ 2x_1 + 6x_2 - x_3 = 7 \\ x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 0 \end{cases}$$

Точное решение $X = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Матрица A обладает свойством диагонального преобладания.

Выразим неизвестные

$$x_1 = (x_2 - x_3 + 4)/4$$

$$x_2 = (-2x_1 + x_3 + 7)/6$$

$$x_3 = (x_1 + 2x_2)/3$$

$$\| \mathbf{B} \|_I = \max_{j=1}^2 \sum_{i=1}^2 |b_{ij}| = \left\{ \frac{1}{4} + \frac{1}{4}; \frac{1}{3} + \frac{1}{6}; \frac{1}{3} + \frac{2}{3} \right\} = \left\{ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 1 \right\} = 1 -$$

не выполняется.

Но по второму признаку сходится

$$\| \mathbf{B} \|_{II} = \left\{ \frac{1}{4} + \frac{1}{3} + \frac{1}{3}; \frac{1}{4} + \frac{1}{6} + \frac{2}{3} \right\} = \frac{13}{42} < 1.$$

В качестве начального приближения принимаем

$$x_1^{(0)} = 0, \quad x_2^{(0)} = 0, \quad x_3^{(0)} = 0.$$

Найдем новое приближение неизвестных

$$x_1^{(1)} = \frac{x_2^{(0)} - x_3^{(0)} + 4}{4} = \frac{0 - 0 + 4}{4} = 1$$

$$x_2^{(1)} = \frac{-2x_1^{(1)} + x_3^{(0)} + 7}{6} = \frac{-2 \cdot 1 + 0 + 7}{6} = \frac{5}{6}$$

$$x_3^{(1)} = \frac{x_1^{(1)} + 2x_2^{(1)}}{3} = \frac{1 + 2 \cdot \frac{5}{6}}{3} = \frac{8}{9}$$

Аналогичным образом находим следующее приближение:

$$x_1^{(2)} = \frac{x_2^{(1)} - x_3^{(1)} + 4}{4} = \frac{\frac{5}{6} - \frac{8}{9} + 4}{4} = \frac{71}{72}$$

$$x_2^{(2)} = \frac{-2x_1^{(2)} + x_3^{(1)} + 7}{6} = \frac{-2 \cdot \frac{71}{72} + \frac{8}{9} + 7}{6} = \frac{71}{72}$$

$$x_3^{(2)} = \frac{x_1^{(2)} + 2x_2^{(2)}}{3} = \frac{\frac{71}{72} + 2 \cdot \frac{71}{72}}{3} = \frac{71}{72}$$

и т.д.

Практическая схема реализации метода Зейделя аналогична схеме метода простой итерации. Сначала устанавливается наличие сходимости метода для исходной системы, затем строится циклический процесс по формулам (5.34) или (5.35).

5.4. Метод релаксации

Каким-либо образом приведем систему (2.1) к виду

$$\mathbf{X} = \mathbf{B}\mathbf{X} + \mathbf{g}. \quad (5.45)$$

Для итерационного процесса важным является не только наличие сходимости процесса, но и скорость этой сходимости. Метод релаксации является изменением метода Зейделя с целью увеличения сходимости итерационного процесса. В алгоритм построения итерационной последовательности $\mathbf{X}^{(1)}, \mathbf{X}^{(2)}, \dots, \mathbf{X}^{(k)}$, по методу релаксации вводят параметр релаксации ω , который управляет сходимостью итерационного процесса. Формула для итерационной последовательности метода релаксации имеет вид:

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = (1-\omega)\mathbf{X}^{(k)} + \omega[\mathbf{L}\mathbf{X}^{(k+1)} + (\mathbf{R}+\mathbf{D})\mathbf{X}^{(k)} + \mathbf{g}], \quad (5.46)$$

где \mathbf{L} – нижняя треугольная матрица,

\mathbf{R} – верхняя треугольная матрица,

\mathbf{D} – диагональная матрица (см. метод Зейделя).

$\omega = \text{const}$ – параметр релаксации. Обычно значения этого параметра выбираются следующим образом $0 < \omega < 2$, чтобы обеспечить сходимость процесса (5.45).

При $\omega = 1$ алгоритм (5.46) соответствует методу Зейделя. При $2 > \omega > 1$ алгоритм (5.46) называют методом верхней релаксации, при

$\omega < 1$ – метод нижней релаксации. Согласно (5.46) компоненты вектора $\mathbf{X}^{(k+1)}$ вычисляются по формулам:

$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} + \omega \left(\sum_{j=1}^{i-1} b_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n b_{ij}x_j^{(k)} + g_i \right) \quad i=1, \dots, n \quad (5.47)$$

Первый достаточный признак сходимости метода релаксации. Если матрица \mathbf{B} и параметр релаксации ω удовлетворяют условиям

$$\|\mathbf{B}\|_I = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^n |b_{ij}| < 1, \quad 0 < \omega < 1, \quad (5.48)$$

метод релаксации (5.45) сходится.

Предполагая диагональные элементы a_{ii} матрицы \mathbf{A} задачи (2.1) отличными от нуля, приведем систему (2.1) $\mathbf{AX}=\mathbf{f}$ к канонической форме (5.45) $\mathbf{X}=\mathbf{BX}+\mathbf{g}$, разрешив первое уравнение системы (2.1) относительно x_1 , второе уравнение – относительно x_2 , третье – относительно x_3 и т.д.:

$$\begin{cases} x_1 = \frac{-a_{12}x_2 - a_{13}x_3 - \dots - a_{1n}x_n + f_1}{a_{11}} \\ x_2 = \frac{-a_{21}x_1 - a_{23}x_3 - \dots - a_{2n}x_n + f_2}{a_{22}} \\ \dots \\ x_n = \frac{-a_{n1}x_1 - a_{n2}x_2 - \dots - a_{n,n-1}x_{n-1} + f_n}{a_{nn}} \end{cases}$$

Полученная система имеет вид (5.45), где

$$b_{11}=0, \quad b_{ij} = \frac{-a_{ij}}{a_{ii}}, \quad g_i = \frac{f_i}{a_{ii}}, \quad i, j=1, 2, \dots, n; \quad j \neq i.$$

В этом случае алгоритм метода релаксации (5.46) примет вид:

$$\mathbf{x}_i^{(k+1)} = \left(-\omega \tilde{\mathbf{x}}_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} + f_i \right) \right) \quad (5.49)$$

Второй достаточный признак сходимости метода релаксации. Если матрица \mathbf{A} является симметричной ($\mathbf{A}=\mathbf{A}^T$) и положительно определенной ($\mathbf{A}>\mathbf{0}$), а параметр релаксации ω выбирается в интервале $0 < \omega < 2$, то метод релаксации сходится.

При использовании метода релаксации важной является проблема выбора оптимального значения параметра релаксации $\omega=\omega_{opt}$, при котором достигается наивысшая скорость сходимости итераций. Для некоторых важных частных случаев эта проблема решена. При оптимальном выборе параметра ω метод релаксации сходится значительно быстрее методов простых итераций и Зейделя.

5.5. Итерационные методы вариационного типа

Рассмотрим теперь итерационные методы вида

$$\frac{\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}}{\tau_{k+1}} + \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{f}, \quad (5.50)$$

в которых параметры τ_{k+1} выбираются из условия минимума погрешности $\|x_{k+1} - x\|$ при заданной погрешности $\|x_k - x\|$.

5.5.1. Метод минимальных невязок

Рассмотрим систему (1.2) с симметричной положительно определенной матрицей \mathbf{A} . Обозначим через

$$\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{f}, \quad (5.51)$$

невязку, которая получается при подстановке приближенного значения x_k , полученного на k -ой итерации, в уравнение (1.2). Заметим, что погрешность $\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}$ и невязка $\mathbf{r}^{(k)}$ связаны равенством $\mathbf{A} \mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{r}^{(k)}$. Рассмотрим явный итерационный метод

$$\frac{\mathbf{X}^{(k+1)} - \mathbf{X}^{(k)}}{\tau_{k+1}} + \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} = \mathbf{f} \quad (5.52)$$

и перепишем его в виде

$$\mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{X}^{(k)} - \tau_{k+1} \mathbf{r}^{(k)}. \quad (5.53)$$

Методом минимальных невязок называется итерационный метод (5.52), в котором параметр τ_{k+1} выбирается из условия минимума $\|\mathbf{r}^{(k+1)}\|$ при заданной норме $\|\mathbf{r}^{(k)}\|$. Получим явное выражение для итерационного параметра τ_{k+1} . Из (5.52) получаем

$$\mathbf{A} \mathbf{X}^{(k+1)} = \mathbf{A} \mathbf{X}^{(k)} - \tau_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{r}^{(k)}$$

и, следовательно,

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \tau_{k+1} \mathbf{A} \mathbf{r}^{(k)} \quad (5.54)$$

т.е. невязка $\mathbf{r}^{(k)}$ удовлетворяет тому же уравнению, что и погрешность $\mathbf{z}^{(k)} = \mathbf{X}^{(k)} - \mathbf{X}$.

Возводя обе части уравнения (5.54) скалярно в квадрат, получим

$$\|\mathbf{r}^{(k+1)}\|^2 = \|\mathbf{r}^{(k)}\|^2 - 2\tau_{k+1} (\mathbf{r}^{(k)}, \mathbf{A} \mathbf{r}^{(k)}) + \tau_{k+1}^2 \|\mathbf{A} \mathbf{r}^{(k)}\|^2 \quad (5.55)$$

Отсюда видно, что $\|\mathbf{r}^{(k+1)}\|$ достигает минимума, если

$$\tau_{k+1} = \frac{(\mathbf{A} \mathbf{r}^{(k)}, \mathbf{r}^{(k)})}{\|\mathbf{A} \mathbf{r}^{(k)}\|^2}. \quad (5.56)$$

Таким образом, в методе минимальных невязок переход от k -ой итерации к $(k+1)$ -ой осуществляется следующим образом. По найденному значению $\mathbf{X}^{(k)}$ вычисляется вектор невязки (5.51) и по формуле (5.56) находится параметр τ_{k+1} . Затем по формуле (5.53) досчитывается вектор $\mathbf{X}^{(k+1)}$.

Метод минимальных невязок сходится с той же скоростью, что и метод простой итерации. Справедлива

Теорема. Пусть A – симметричная положительно определенная матрица. Для погрешности метода минимальных невязок выполняется оценка

$$\|A(X^{(n)} - X)\| \leq \rho_0^n \|A(X^{(0)} - X)\|, \quad n=0, 1, \dots \quad (5.57)$$

где

$$\rho_0 = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)}. \quad (5.58)$$

5.5.2. Метод минимальных поправок

Запишем итерационный метод (5.50) в виде

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} - \tau_{k+1} B^{-1} r^{(k)}, \quad (5.59)$$

где $r^{(k)} = AX^{(k)} - f$ – невязка.

Вектор

$$w^{(k)} = B^{-1} r^{(k)}$$

называется поправкой на $(k+1)$ -ой итерации. Поправка $w^{(k)}$ удовлетворяет тому же уравнению, что и погрешность $z^{(k)} = X^{(k)} - X$ неявного метода, т.е. уравнению

$$B \frac{w^{(k+1)} - w^{(k)}}{\tau_{k+1}} + Aw^{(k)} = 0. \quad (5.60)$$

Будем предполагать, что B – симметричная положительно определенная матрица. Методом минимальных поправок называется неявный итерационный метод (5.50), в котором параметр τ_{k+1} выбирается из условия минимума нормы $\|w^{(k+1)}\|^2$ при заданном векторе $w^{(k)}$. В случае $B = E$ метод минимальных поправок совпадает с методом минимальных невязок.

Найдем выражение для итерационного параметра τ_{k+1} . Перепишем (5.60) в виде $w^{(k+1)} = w^{(k)} - \tau_{k+1} B^{-1} Aw^{(k)}$ и вычислим $\|w^{(k+1)}\|^2 = \|w^{(k)}\|^2 - 2\tau_{k+1} (Aw^{(k)}, w^{(k)}) + \tau_{k+1}^2 (B^{-1} Aw^{(k)}, Aw^{(k)})$.

Отсюда следует, что $\|w^{(k+1)}\|^2$ будет минимальной, если положить

$$\tau_{k+1} = \frac{(Aw^{(k)}, w^{(k)})}{(B^{-1} Aw^{(k)}, Aw^{(k)})}. \quad (5.61)$$

Для реализации метода минимальных поправок требуется на каждой итерации решить систему уравнений $Bw^{(k)} = r^{(k)}$, откуда найдем поправку $w^{(k)}$, и решить систему уравнений $Bv^{(k)} = Aw^{(k)}$, откуда найдем вектор $v^{(k)} = B^{-1} Aw^{(k)}$, необходимый для вычисления параметра τ_{k+1} .

Скорость сходимости метода минимальных поправок определяется границами спектра обобщенной задачи на собственные значения

$$Ax = \lambda Bx. \quad (5.62)$$

Теорема. Пусть A, B – симметричные положительно определенные матрицы и $\lambda_{\min}(B^{-1}A), \lambda_{\max}(B^{-1}A)$ – наименьшее и наибольшее собственные значения задачи (5.62). Для погрешности метода минимальных поправок выполняется оценка

$$\|A(X^{(n)} - X)\| \leq \rho_0^n \|A(X^{(0)} - X)\|, \quad n=0, 1, \dots \quad (5.63)$$

где

$$\rho_0 = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}(B^{-1}A)}{\lambda_{\max}(B^{-1}A)}. \quad (5.64)$$

5.5.3. Метод скорейшего спуска

Рассмотрим явный метод (5.52) и выберем итерационный параметр τ_{k+1} из условия минимума $\|z^{(k+1)}\|^2$ при заданном векторе $z^{(k)}$, где $z^{(k+1)} = x^{(k+1)} - x$. Поскольку погрешность $z^{(k)}$ удовлетворяет уравнению $z^{(k+1)} = z^{(k)} - \tau_{k+1}Az^{(k)}$ имеем

$$\|z^{(k+1)}\|^2 = \|z^{(k)}\|^2 - 2\tau_{k+1}(Az^{(k)}, Az^{(k)}) + \tau_{k+1}^2(z^{(k)}, Az^{(k)}).$$

Следовательно, $\|z^{(k+1)}\|^2$ будет минимальной, если положить

$$\tau_{k+1} = \frac{(Az^{(k)}, Az^{(k)})}{(A^2z^{(k)}, Az^{(k)})}.$$

Так как величина $z^{(k)}$ неизвестна (поскольку неизвестно точное решение x), надо учесть, что $Az^{(k)} = r^{(k)} = Ax^{(k)} - f$, и вычисление τ_{k+1} проводить по формуле

$$\tau_{k+1} = \frac{(r^{(k)}, r^{(k)})}{(Ar^{(k)}, r^{(k)})}. \quad (5.65)$$

Так же, как и в теореме 1, доказывается, что метод скорейшего спуска сходится с той же скоростью, что и метод простой итерации с оптимальным параметром $\tau = \tau_0$. Для погрешности метода скорейшего спуска справедлива оценка

$$\|X^{(n)} - X\| \leq \rho_0^n \|X^{(0)} - X\|, \quad n=0, 1, \dots$$

где

$$\rho_0 = \frac{1 - \xi}{1 + \xi}, \quad \xi = \frac{\lambda_{\min}(A)}{\lambda_{\max}(A)}$$

Пример. Методом скорейшего спуска решить систему линейных алгебраических уравнений с матрицей $AX=f$, где

$$A = \begin{pmatrix} 2,5 & -0,9 & 0,2 \\ -0,9 & 3,8 & -0,1 \\ 0,2 & -0,1 & 0,9 \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} -0,7 \\ 2,5 \\ 0,1 \end{pmatrix}.$$

Выберем начальное приближение $X^{(0)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Рассчитаем вектор невязки по формуле $r^{(0)} = AX^{(0)} - f$.

$$r^{(0)} = \begin{pmatrix} 0,7 \\ -2,5 \\ -0,1 \end{pmatrix}.$$

По формуле (5.65) вычислим $\tau_1 = \frac{(r^{(0)}, r^{(0)})}{(Ar^{(0)}, r^{(0)})}$, $\tau_1 = 0,2406$.

Приближение $X^{(1)}$ вычислим по формуле (5.53):

$$X^{(1)} = X^{(0)} - \tau_1 r^{(0)}.$$

$$X^{(1)} = \begin{pmatrix} -0,168 \\ 0,601 \\ 0,024 \end{pmatrix}.$$

Рассчитаем вектор невязки по формуле $r^{(1)} = AX^{(1)} - f$.

$$r^{(1)} = \begin{pmatrix} -0,258 \\ -0,065 \\ -0,172 \end{pmatrix}.$$

По формуле (5.65) вычислим $\tau_2 = \frac{(r^{(1)}, r^{(1)})}{(Ar^{(1)}, r^{(1)})}$, $\tau_2 = 0,5168$.

Приближение $X^{(2)}$ вычислим по формуле (5.53):

$$X^{(2)} = X^{(1)} - \tau_2 r^{(1)}.$$

$$X^{(2)} = \begin{pmatrix} -0,035 \\ 0,635 \\ 0,113 \end{pmatrix}.$$

Рассчитаем вектор невязки по формуле $r^{(2)} = AX^{(2)} - f$.

$$r^{(2)} = \begin{pmatrix} 0,063 \\ -0,066 \\ -0,069 \end{pmatrix}.$$

По формуле (5.65) вычислим $\tau_3 = \frac{(\epsilon_3, r_3)}{(Ar_3, r_3)}$, $\tau_3 = 0,3678$.

Приближение $X^{(3)}$ вычислим по формуле (5.53):
 $X^{(3)} = X^{(2)} - \tau_3 r_3$.

$$X^{(3)} = \begin{pmatrix} -0,058 \\ 0,659 \\ 0,138 \end{pmatrix}.$$

Данный итерационный процесс можно продолжать до требуемой точности.

РЕПОЗИТОРИЙ ВГУ

Контрольные вопросы

1. Сформулируйте постановку задачи решения системы n линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) и укажите условия существования и единственности решения.
2. Сформулируйте определение нормы вектора.
3. Дайте определение нормы матрицы. Какие вы знаете свойства нормы матрицы?
4. Приведите примеры норм векторов и подчиненных им норм матриц.
5. Дайте определение числа обусловленности матрицы.
6. Приведите свойства числа обусловленности матрицы.
7. Что такое плохо обусловленная система уравнений?
8. Определите корректность постановки задачи решения СЛАУ.
9. Укажите классификацию методов решения СЛАУ.
10. Дайте определения прямых и итерационных методов решения СЛАУ.
11. Что такое LU-разложение матрицы?
12. На примере СЛАУ из трех уравнений объясните смысл схем метода Гаусса: единственного деления, с выбором главного элемента, Жордана.
13. Запишите формулы для преобразования элементов матрицы на k -ом шаге прямого хода метода Гаусса.
14. Запишите формулы для преобразования элементов матрицы на k -ом шаге обратного хода метода Гаусса.
15. Для каких матриц применим метод квадратного корня?
16. Какими достоинствами обладает метод квадратного корня?
17. Каким образом при решении СЛАУ методом Гаусса можно попутно вычислить определитель матрицы системы?
18. Приведите достаточные условия устойчивости метода прогонки.
19. Проведите качественное сравнение прямых методов решения СЛАУ.
20. Охарактеризуйте итерационные методы решения СЛАУ.
21. Приведите критерий сходимости метода простой итерации.
22. На примере СЛАУ из трех уравнений объясните смысл метода простой итерации, метода Зейделя, метода скорейшего спуска, метода релаксации.
23. Приведите критерий сходимости метода Зейделя.
24. Проведите качественное сравнение прямых и итерационных методов решения СЛАУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Бином, 2004. – 636 с.
2. Калиткин Н.Н. Численные методы: учеб. пособие. – М.: Наука, 1978. – 512 с.
3. Марчук П.И. Методы вычислительной математики. – М.: Наука, 1989. – 608 с.
4. Самарский А.А. Введение в численные методы. – М.: Наука, 1983. – 272 с.
5. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989. – 432 с.
6. Бахвалов Н.С. Численные методы в задачах и упражнениях: учеб. пособие. – М.: Высшая школа, 2000. – 190 с.
7. Сборник задач по методам вычислений: учеб. пособие для студентов учреждений, обеспечивающих получение высш. образования по физико-математическим спец. / под ред. П.И. Монастырного. – Минск: Издательский центр БГУ, 2007. – 376 с.
8. Киреев В.И., Пантелеев А.В. Численные методы в примерах и задачах: учебн. пособие., – М.: Высшая школа, 2006. – 480 с.
9. Турчак Л.И. Основы численных методов: учеб. пособие для студентов вузов. 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Физматлит., 2002. – 300 с.