Решение систем уравнений.

Рассмотрим численные методы решения систем уравнений вида:

Ax=f

(A-матрица, f-известный, а u-неизвестный векторы-столбцы) . Будем считать, что det A≠0, т.е с-ет единственное решение $u=A^{-1}f$.

Прямые методы:

1) Метод Эйлера

Основан на идее последовательного исключения и состоит из 2-х этапов:

1) прямой ход --- матрица A приводится к треугольному виду, в результате чего получаем уравнение:

$$x+B^*x=\varphi, \qquad (*)$$

где B*---верхняя 3-угольная матрица.

2) обратный ход --- последовательное определение значений компонентов вектора x из (*).

Подсчитаем число умножений и делений в методе Гаусса. Рассмотрим сначала прямой ход. На первом шаге требуется $Q_1=N^2$ делений и умножений, второй шаг требует $Q_2=(N-1)^2$ действий и т. д. Всего надо сделать N шагов прямого хода, затратив на это

$$\sum_{k=1}^{N}(N-k+1)^2=\sum_{s=1}^{N}s^2=\frac{N(N+1)(2N+1)}{6}$$

умножений и делений. Для обратного хода, очевидно, нужно сделать $N(N-1)/2$ умножений. Таким образом, для решения системы уравнений (1) требуется $Q=N(N^2+3N-1)/3$ умножений и делений. Примерно столько же потребуется сложений.

2)Метод квадратного корня

Пригоден для систем с эрмитовой матрицей A.

Идея метода: представим A в виде: $A=S^{+}DS$, где S- верхняя 3-угольная матрица, $(s_{ij})^{+}=(s_{ji})^{*}$, D-диагональная матрица. В рез-те приходим к с-ме уравнений $S^*Dy=f,\quad Su=y$, метод решения которых аналогичен обратному ходу в методе Эйлера.

Чтобы найти матрицу S необходимо решить систему уравнений:

$$\sum_{k=1}^{N}\overset{*}{s}_{ki}d_{kk}s_{kj}=a_{ij}$$

Её можно решать рекуррентно.

Так как S — верхняя треугольная матрица, то $s_{ki}=0$ при $k>i$, $\bar{s}_{ik}=0$ при $k<i$ и, следовательно,

$$\sum_{k=1}^{N}\overset{*}{s}_{ki}s_{kj}d_{kk}=\sum_{k=1}^{i-1}\overset{*}{s}_{ki}s_{kj}d_{kk}+\overset{*}{s}_{ii}s_{ij}d_{ii}+\sum_{k=i+1}^{N}\overset{*}{s}_{ki}s_{kj}d_{kk}=\sum_{k=1}^{i-1}\overset{*}{s}_{ki}s_{kj}d_{kk}+\overset{*}{s}_{ii}s_{ij}d_{ii}=a_{ij}.$$

При i=j имеем: $|s_{ii}|^2d_{ii}=a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}|s_{ki}|^2d_{kk}$. Положим $d_{ii}=\operatorname{sign}\left(a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}|s_{ki}|^2d_{kk}\right)$

Тогда:
$$\begin{cases} s_{ii}=\sqrt{\left|a_{ii}-\sum_{k=1}^{i-1}|s_{ki}|^2d_{kk}\right|}, \\ s_{ij}=\dfrac{a_{ij}-\sum_{k=1}^{i-1}\overset{*}{s}_{ki}s_{kj}d_{kk}}{\overset{*}{s}_{ii}d_{ii}}, \text{(здесь i<j).}\end{cases}$$

Метод квадратного корня требует порядка $N^3/2$ арифметических действий, т.е. при больших N он вдвое быстрее метода Гаусса и занимает вдвое меньше ячеек памяти, чего удалось достичь за счёт учёта симметрии м-цы А.

Связь метода Гаусса с разложением матрицы на множители. Пусть дана невырожденная матрица A размера $N \times N$. Представим ее в виде произведения

$$A = BC, \quad A = (a_{ij}), \quad B = (b_{ij}), \quad C = (c_{ij}), \quad (1)$$

где B и C — треугольные матрицы вида

$$B = \begin{bmatrix} b_{11} & 0 & \cdot & \ldots & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 & \ldots & 0 \\ b_{31} & b_{32} & b_{33} & \ldots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ b_{N1} & b_{N2} & b_{N3} & \ldots & b_{NN} \end{bmatrix}, \quad C = \begin{bmatrix} 1 & c_{12} & c_{13} & \ldots & c_{1N} \\ 0 & 1 & c_{23} & \ldots & c_{2N} \\ 0 & 0 & 1 & \ldots & c_{3N} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 \end{bmatrix},$$

т. е. $b_{ik} = 0$ при $k > i$, $c_{ik} = 0$ при $k < i$, $c_{ii} = 1$. Из (1) следует, что $a_{ij} = \sum_{k=1}^{N} b_{ik}c_{kj}$.

Преобразуем эту сумму двумя способами:

$$\sum_{k=1}^{N} b_{ik}c_{kj} = \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik}c_{kj} + b_{ii}c_{ij} + \sum_{k=i+1}^{N} b_{ik}c_{kj} = \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik}c_{kj} + b_{ii}c_{ij},$$

$$\sum_{k=1}^{N} b_{ik}c_{kj} = \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik}c_{kj} + b_{ij}c_{jj} + \sum_{k=j+1}^{N} b_{ik}c_{kj} = \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik}c_{kj} + b_{ij}c_{jj}.$$

Отсюда находим

$$b_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} b_{ik}c_{kj} \qquad \text{при} \quad i \geqslant j, \quad b_{11} = a_{11}, \quad c_{11} = 1,$$

$$c_{ij} = \frac{1}{b_{ii}}\left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} b_{ik}c_{kj}\right] \quad \text{при} \quad i < j.$$

Матрицы B и C найдены.

Решение уравнения $Au = BCu = f$ сводится к последовательному решению уравнений

$$B\varphi = f, \quad Cu = \varphi.$$

Построение матриц B и C и нахождение $\varphi = B^{-1}f$ соответствуют прямому ходу, а решение уравнения

$$Cu = \varphi$$

соответствует обратному ходу метода Гаусса.

Итерационные методы:

Общие замечания

С-му уравнений **Ax=f** можно решать методом последовательных приближений. Для этого выбираетс начальное приближение y_0 и последовательно находятся *итерации* $y_1, y_2\ldots$ ($y_k|_{k\to\infty}\to X$). Если при вычислении y_{k+1} используется только y_k, то метод является *одношаговым (двухслойным)*, если же привлекаетя y_{k-1}, то *двухшаговым (трёхслойным)* и т. д..

Каноническая форма двухслойного метода: $$B\frac{y_{k+1}-y_k}{\tau_{k+1}}+Ay_k=f$$

Условие на **B**: **Det B≠0.**

При $B=\delta_{ij}\left(\text{т.е. } \frac{y_{k+1}-y_k}{\tau_{k+1}}+Ay_k=f\right)$ метод называют явным, в противном случае-неявным. В последнем случае предполагается, что соответствующая задача $By_{k+1}=By_k-\tau_{k+1}(Ay_k-f)=F_k$ более проста,чем исходная.

В случае, если B=const, τ=const относительно k, итерационный метод наз. *стационарным*.

1) Метод простой итерации

1-й вариант:

$$y^{(i)}{}_{k+1}-y^{(i)}{}_k=-\tau\left(\sum_{j=1}^{N}a_{ij}y^{(j)}{}_k-f^{(i)}\right) \quad \text{или} \quad \frac{y_{k+1}-y_k}{\tau}+Ay_k=f$$

Здесь τ>0, т.о. схема явная, двухслойная.

2-й вариант:

$$y^{(i)}{}_{k+1}=\frac{1}{a_{ii}}\left(\sum_{i\neq i}a_{ij}y^{(j)}{}_k-f^{(i)}\right)$$ Учитывая выражение,

$$\sum_{j\neq i}^{1+N}a_{ij}y_k^{(j)}=\sum_{j=1}^{N}a_{ij}y_k^{(j)}-a_{ii}y_k^{(i)}=(Ay_k)^{(i)}-(Dy_k)^{(i)}$$

перепишем это соотношение в каноническом виде:

$$D\frac{y_{k+1}-y_k}{\tau_{k+1}}+Ay_k=f \quad (\text{где } D=(a_{ii}\delta_{ij}))$$ --- диагональная матрица.

В данноу схеме y_{k+1} определяется по явным формулам, хотя формальносхема является неявной ($B\neq\delta_{ij}$).

1) Метод Зейделя

Широко применяется в случаях, когда информации о матрице A недостаточно.

$$\sum_{j=1}^{i}a_{ij}y_{k+1}^{(j)}+\sum_{j=i+1}^{N}a_{ij}y_k^{(j)}=f^{(i)},\quad a_{ii}\neq 0,\quad i=1,2,\ldots,N,$$

$$\sum_{j=1}^{i}a_{ij}y_k^{(j)}+\sum_{j=i+1}^{N}a_{ij}y_{k+1}^{(j)}=f^{(i)},\ i=1,2,\ldots,N.$$

Из обеих формул компоненты вектора y_{k+1} находятся последовательно:

$$y_{k+1}^{(1)}=\frac{1}{a_{11}}\left(f^{(1)}-\sum_{j=2}^{N}a_{ij}y_k^{(j)}\right),$$

$$y_{k+1}^{(i)}=\frac{1}{a_{ii}}\left(f^{(i)}-\sum_{j=i+1}^{N}a_{ij}y_k^{(j)}-\sum_{j=1}^{i-1}a_{ij}y_{k+1}^{(j)}\right),\ i=2,\ldots,N.$$

$$y_{k+1}^{(N)} = \frac{1}{a_{NN}}\left(f^{(N)} - \sum_{i=1}^{N-1} a_{Nj} y_k^{(j)}\right),$$

$$y_{k+1}^{(i)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(f^{(i)} - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} y_k^{(j)} - \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij} y_{k+1}^{(j)}\right),$$
$$i = N-1, \ldots, 1.$$

Запишем этот метод в матричной (операторной) форме. Для этого представим матрицу A в виде суммы

$$A = A^- + D + A^+,$$

где $D = (a_{ii}\delta_{ij})$ — диагональная матрица размера $N \times N$, $A^- = (a_{ij}^-)$ — нижняя треугольная (поддиагональная) матрица с нулями на главной диагонали, $a_{ij}^- = 0$ при $j \geqslant i$, $a_{ij}^- = a_{ij}$ при $j < i$, $A^+ = (a_{ij}^+)$ — верхняя треугольная (наддиагональная) матрица с нулями на главной диагонали, $a_{ij}^+ = 0$ при $j \leqslant i$, $a_{ij}^+ = a_{ij}$ при $j > i$. Из определения A^-, D, A^+ следует, что

$$Dy^{(i)} = a_{ii} y^{(i)}, \quad A^- y^{(i)} = \sum_{j=1}^{-1} a_{ij} y^{(j)},$$

$$A^+ y^{(i)} = \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij} y^{(j)}, \quad (A^+ + D)\, y^{(i)} = \sum_{j=i}^{N} a_{ij} y^{(j)}.$$

Поэтому уравнение (10) можно записать в виде

$$((A^+ + D) y_{k+1})^{(i)} + (A^- y_k)^{(i)} = f^{(i)}, \quad i = 1, 2, \ldots, N,$$

или, в векторной форме,

$$(A^+ + D) y_{k+1} + A^- y_k = f.$$

После очевидных преобразований

$$(A^+ + D) y_{k+1} + A^- y_k = (A^+ + D)(y_{k+1} - y_k) +$$
$$+ (A^- + (A^+ + D)) y_k = (A^+ + D)(y_{k+1} - y_k) + A y_k$$

запишем метод Зейделя (10) в каноническом виде:

$$(D + A^+)(y_{k+1} - y_k) + A y_k = f, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Сравнивая с (2), видим, что метод Зейделя соответ-

2)ствует

$$B = D + A^+, \quad \tau = 1,$$

т. е. схема является неявной. Однако, так как $B = D + A^+$ — треугольная матрица, то итерация y_{k+1} находится по явным формулам. Аналогично записывается и другой вариант метода Зейделя:

$$(D + A^-)(y_{k+1} - y_k) + Ay_k = f, \qquad k = 0,\ 1,\ \ldots,$$

когда $B = D + A^-$ — нижняя треугольная матрица.

Показано, что метод Зейделя сходится, если A — симметричная положительно определенная матрица.

2)**Метод верхней релаксации.**

Чтобы ускорить итерационный процесс, можно привести метод Зейделя к методу верхней релаксации, вводя итерационный параметр ω, так что

$$(D + \omega A^-)\,\frac{y_{k+1} - y_k}{\omega} + Ay_k = f, \quad k = 0, 1, \ldots, \text{ для всех } y_0 \in H.$$

видим, что $B = D + \omega A^-, \quad \tau = \omega.$

Преобразуем уравнение к расчетному виду. Учитывая, что

$$(D + \omega A^-)\,\frac{y_{k+1} - y_k}{\omega} + Ay_k = \left(A^- + \frac{1}{\omega}D\right)y_{k+1} +$$

$$+\left(A - A^- - \frac{D}{\omega}\right)y_k = \left(A^- + \frac{1}{\omega}D\right)y_{k+1} + \left(A^+ + \left(1 - \frac{1}{\omega}\right)D\right)y_k,$$

имеем

$$\left(A^- + \frac{1}{\omega}\,D\right)y_{k+1} + \left(A^+ + \left(1 - \frac{1}{\omega}\right)D\right)y_k = f.$$

Отсюда находим

$$y_{k+1}^{(i)} = y_k^{(i)} + \frac{\omega}{a_{ii}}\left[f^{(i)} - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}y_{k+1}^{(j)} - \sum_{j=i}^{N} a_{ij}y_k^{(j)}\right], \; i = 1, 2, \ldots, N.$$

При $\omega = 1$ получаем формулу метода Зейделя.

Скорость сходимости метода верхней релаксации зависит от параметра ω.

Для сходимости метода надо потребовать, чтобы $0 < \omega < 2$.

3) Вариационно-итерационные методы

1. Метод минимальных невязок. До сих пор при изучении итерационных методов мы всюду предполагали, что постоянные γ_1 и γ_2 — границы спектра оператора A в H или в H_B — известны. Что делать, если такой информации нет? В этом случае можно применять методы, не использующие в явном виде параметры γ_1 и γ_2. Это методы вариационного типа. Здесь мы рассмотрим методы минимальных невязок, скорейшего спуска и сопряженных

Начнем с *метода минимальных невязок* для явной схемы

$$\frac{y_{k+1}-y_k}{\tau_{k+1}}+Ay_k=f, \qquad k=0,1,\ldots, \text{ для всех } y_0\in H. \tag{1}$$

Для невязки $r_k=Ay_k-f$ имеем однородное уравнение

$$\frac{r_{k+1}-r_k}{\tau_{k+1}}+Ar_k=0, \quad k=0,1,\ldots, \quad r_0=Ay_0-f. \tag{2}$$

Параметр τ_{k+1} будем выбирать из условия минимума невязки r_{k+1} по норме:

$$\|r_{k+1}\|^2=\|r_k-\tau_{k+1}Ar_k\|^2=$$
$$=\|r_k\|^2-2\tau_{k+1}(r_k, Ar_k)+\tau_{k+1}^2\|Ar_k\|^2=\varphi(\tau_{k+1}).$$

Продифференцируем это выражение по τ_{k+1}, приравняем производную $\varphi'(\tau_{k+1})$ нулю:

$$\varphi'(\tau_{k+1})=-2(r_k, Ar_k)+2\tau_{k+1}\|Ar_k\|^2=0$$

и найдем

$$\tau_{k+1}=\frac{(Ar_k, r_k)}{\|Ar_k\|^2}, \quad k=1,2,\ldots \tag{3}$$

При этом значении τ_{k+1} вторая производная $\varphi''(\tau_{k+1})$ положительна и, следовательно, достигается $\min\limits_{\tau_{k+1}}\|r_{k+1}\|^2$.

В случае неявного метода невязок, или *метода поправок*, вместо (1) получаем уравнение для поправки:

$$B\,\frac{w_{k+1}-w_k}{\tau_{k+1}}+Aw_k=0,\quad k=0,1,\ldots,$$

$$w_k=B^{-1}r_k,\quad w_0=B^{-1}(Ay_0-f),\qquad (5)$$

где τ_{k+1} определяется по формуле

$$\tau_{k+1}=\frac{(Aw_k,\,w_k)}{\left(B^{-1}Aw_k,\,Aw_k\right)},\qquad k=0,1,\ldots\qquad (6)$$

Вместо (4) получаем оценку

$$\|Ay_n-f\|_{B^{-1}}\leqslant\rho_0^n\|Ay_0-f\|_{B^{-1}}.$$

2. Метод скорейшего спуска. Явный *метод скорейшего спуска* отличается от метода минимальных невязок только формулой для τ_{k+1}:

$$\tau_{k+1}=\frac{(r_k,\,r_k)}{(Ar_k,\,r_k)},\qquad k=0,1,\ldots\qquad (7)$$

Эта формула получается либо из условия минимума нормы $\|z_{k+1}\|_A$ погрешности $z_{k+1}=y_{k+1}-u$, либо из условия ортогональности невязок r_k и r_{k+1}. Умножая скалярно уравнение $r_{k+1}=r_k-\tau_{k+1}Ar_k$ на r_k, получаем $0=(r_k,\,r_k)-\tau_{k+1}(Ar_k,\,r_k)$, откуда следует формула (7). Поскольку $Az_k=Ay_k-Au=r_k$, то

$$(Az_{k+1},\,z_{k+1})=\left(Az_k-\tau_{k+1}A^2z_k,\,z_k-\tau_{k+1}Az_k\right)=$$
$$=(r_k-\tau_{k+1}Ar_k,\,z_k-\tau_{k+1}r_k)=(r_k,\,z_k)-$$
$$-2\tau_{k+1}(r_k,\,r_k)+\tau_{k+1}^2(Ar_k,\,r_k).$$

Дифференцируя $\|z_{k+1}\|_A^2$ по τ_{k+1} и приравнивая производную нулю, получим (7).

Далее, имеем

$$\|z_{k+1}\|_A^2=\|(E-\tau_{k+1}A)\,z_k\|_A^2\leqslant\|(E-\tau_0A)\,z_k\|_A^2\leqslant$$
$$\leqslant\|E-\tau_0A\|^2\|z_k\|_A^2\leqslant\rho_0^2\|z_k\|_A,$$

т. е.

$$\|z_{k+1}\|_A=\|y_{k+1}-u\|_A\leqslant\rho_0^n\|y_0-u\|_A.$$