Тема : Прямые методы решения СЛАУ

$\mathbf{1^0}$. Решение систем с диагональной и верхней треугольной матрицами. Прямой и обратный ход метода в случае матриц общего вида. $\mathbf{2^0}$. Метод исключения Гаусса: формулировка в покомпонентном и матричном вариантах. $\mathbf{3^0}$. Обратный ход метода исключения. $\mathbf{4^0}$. $(\boldsymbol{LU})$-разложения матриц. Модификация метода Гаусса с выбором главного элемента. Условие диагонального преобладания. $\mathbf{5^0}$. Итерационное уточнение решения. $\mathbf{6^0}$. Формулы решения системы при известном $(\boldsymbol{LU})$ разложении ее матрицы. $\mathbf{7^0}$. Формулы для сомножителей $(\boldsymbol{L})$ и $(\boldsymbol{U})$ при известной матрице $\boldsymbol{A = LU}$. $\mathbf{8^0}$. Метод Холецкого (метод квадратного корня).

3^0. Прямой ход метода Гаусса приводит к системе линейных уравнений $\boldsymbol{A}_{n-1}\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}_{n-1}$, в которой

$$\boldsymbol{A}_{n-1} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \cdots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \cdots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn}^{(n-1)} \end{pmatrix}.$$

Матрица A_{n-1} является верхней треугольной и соответствующую ей систему решают следующим образом.

Сначала вычисляют последнюю компоненту искомого вектора $\overrightarrow{u}$ по формуле

$$u_n = \frac{f_n^{(n-1)}}{a_{nn}^{(n-1)}}.$$

Далее при убывании номера k от $(n-1)$ до 1 используют следующие рекуррентные расчетные формулы:

$$u_k = \frac{1}{a_{kk}^{(k-1)}}\Big(f_k^{(k-1)} - a_{k,k+1}^{(k-1)}u_{k+1} - a_{k,k+2}^{(k-1)}u_{k+2} -$$

$$-a_{k,k+3}^{(k-1)}u_{k+3} - \ldots - a_{k,n}^{(k-1)}u_n\Big), \quad k = n-1, \ldots, 1.$$

Изложенный алгоритм решения системы практически реализуем при условии, что

$$a_{11} \neq 0, \quad a_{22}^{(1)} \neq 0, \quad a_{33}^{(2)} \neq 0, \ldots, \quad a_{nn}^{(n-1)} \neq 0.$$

Количество арифметических операций прямого хода метода Гаусса — это величина $\approx \frac{2}{3}n^3$, обратный же его ход требует выполнения $\approx n^2$ арифметических операций.

$4^{\mathbf{0}}$. Из известного матричного равенства

$$\boldsymbol{(AB)^{-1} = B^{-1} \cdot A^{-1}}$$

и равенства

$$\boldsymbol{A_{n-1} = N_{n-1} N_{n-2} N_{n-3} \dots N_2 N_1 A}$$

следует, что

$$\boldsymbol{A = N_1^{-1} N_2^{-1} N_3^{-1} \dots N_{n-1}^{-1} \cdot A_{n-1} = L \cdot A_{n-1}.}$$

Матрица $\boldsymbol{L}$ здесь получается по формуле

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{N}_1^{-1}\boldsymbol{N}_2^{-1}\boldsymbol{N}_3^{-1}\ldots\boldsymbol{N}_{n-1}^{-1}.$$

Проведя необходимые вычисления, получим для матрицы $\boldsymbol{L}$ следующее выражение:

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \eta_{\mathbf{21}} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \eta_{\mathbf{31}} & \eta_{\mathbf{32}} & \mathbf{1} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \eta_{\boldsymbol{n}\mathbf{1}} & \eta_{\boldsymbol{n}\mathbf{2}} & \eta_{\boldsymbol{n}\mathbf{3}} & \cdots & \mathbf{1} \end{bmatrix}.$$

Поддиагональные элементы $\eta_{k,j}$ матрицы L задаются равенствами

$$\eta_{k,j} = \frac{a_{kj}^{(j-1)}}{a_{jj}^{(j-1)}}, \qquad k = j+1, j+2, \ldots, n.$$

Матрица L — нижняя треугольная и, таким образом, исходная матрица A представлена произведением нижней треугольной матрицы L на верхнюю треугольную матрицу

$U \equiv A_{n-1}$. Равенство $A = L \cdot U$ называют LU-разложением исходной матрицы A.

Представленный вариант разложения матрицы $A = LU$ по методу Гаусса — далеко не единственный способ ее представления в виде произведения нижней треугольной матрицы на верхнюю треугольную.

В реальных вычислениях используется метод Гаусса с выбором на каждом шаге главного (ведущего) элемента.

Метод Гаусса с выбором главного элемента по столбцу осуществляется в следующем порядке. Перед исключением u_1 находится максимум модулей элементов 1-го столбца матрицы, то есть величина

$$\max_{1 \leqslant i \leqslant n} |a_{i1}|.$$

Если этот максимум достигается на номере $i = k$, $k \neq 1$, то k-ое уравнение системы меняется местами с первым (то есть в матрице переставляются первая и k-ая строки).

Затем u_1 исключается из 2-го, 3-го и последующих уравнений преобразованной системы.

На втором шаге находится максимум модулей элементов 2-го столбца матрицы A_1, стоящих под первой строкой, то есть величина

$$\max_{2\leqslant i\leqslant n} |a_{i2}^{(1)}|.$$

Затем меняются местами второе уравнение и уравнение, на котором этот второй максимум достигается, и исключается неизвестное u_2 из всех уравнений, начиная с третьего. Дальнейшие построения проводятся по индукции, как в основном методе Гаусса.

Аналогично осуществляется метод с выбором главного элемента по строкам. При этом местами меняются не уравнения, а столбцы вместе с соответствующей сменой индексов у компонентов u_j и u_k.

Кроме того используется также метод с выбором главного элемента по всей матрице.

Проблем в реализации метода исключения не возникает в случае, если матрица системы обладает диагональным преобладанием.

Определение. *Матрица A удовлетворяет условию диагонального преобладания, если*

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, i \neq j}^{n} |a_{ij}|, \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

5^0. Полученное каким-либо способом решение СЛАУ

$$A\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}$$

можно уточнить, действуя следующим образом.

Пусть $\overrightarrow{u}^1$ — предварительно полученное прямым методом численное решение системы.

Вектору $\overrightarrow{u}^1$ соответствует следующий *вектор невязки*:

$$\overrightarrow{r^1} = \overrightarrow{f} - A\overrightarrow{u}^1.$$

Невязка возникает из-за ошибок округления при реализации метода.

Погрешность $\overrightarrow{\varepsilon^1} = \overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}^1$ удовлетворяет следующей СЛАУ:

$$A\overrightarrow{\varepsilon^1} = A\overrightarrow{u} - A\overrightarrow{u}^1 = \overrightarrow{f} - A\overrightarrow{u}^1 = \overrightarrow{r^1}.$$

Решив эту систему, то есть отыскав $\overrightarrow{\varepsilon^1}$, полагаем затем

$$\overrightarrow{u}^2 = \overrightarrow{u}^1 + \overrightarrow{\varepsilon^1}.$$

Это и есть искомое уточнение. Процедуру уточнения легко продолжить, организовав итерационный процесс с помощью рекуррентных соотношений

$$\overrightarrow{u}^{k+1} = \overrightarrow{u}^k + \overrightarrow{\varepsilon^k}, \quad k = 1, 2, \ldots .$$

6^0. Разложение матрицы A системы в произведение LU нижней треугольной матрицы L и верхней треугольной матрицы U, получаемое методом исключения Гаусса, далеко не единственно.

Численное решение СЛАУ в случае, если разложение $A = LU$ известно, производится по следующей схеме.

Пусть $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$, тогда $\boldsymbol{LU}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \overrightarrow{\boldsymbol{f}}$.

Введем вспомогательный вектор $\overrightarrow{\boldsymbol{v}} = \boldsymbol{U}\overrightarrow{\boldsymbol{u}}$, тогда

$$\boldsymbol{L}\overrightarrow{\boldsymbol{v}} = \overrightarrow{\boldsymbol{f}}.$$

Это система с нижней треугольной матрицей $\boldsymbol{L}$. Решив ее, получим правую часть следующей системы:

$$\boldsymbol{U}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \overrightarrow{\boldsymbol{v}}.$$

Ее матрица — это известная верхняя треугольная матрица U.

Если $L = (l_{ij})$, где

$$l_{jj} = 1, \quad l_{ij} = 0 \quad \text{при} \quad i < j,$$

то система $L\overrightarrow{v} = \overrightarrow{f}$ решается по следующим расчетным формулам:

$$v_1 = f_1; \quad v_k = f_k - \sum_{j=1}^{k-1} l_{kj} v_j, \quad k = 2, 3, \ldots, n.$$

Далее, система $\boldsymbol{U\vec{u} = \vec{v}}$, где

$$\boldsymbol{U = (u_{ij}), \quad u_{jj} \neq 0, \quad u_{ij} = 0} \quad \text{при} \ \boldsymbol{i > j,}$$

решается следующим образом.

Сначала находим последнюю компоненту вектора

$$\boldsymbol{u_n = \frac{v_n}{u_{nn}}, \quad u_{nn} \neq 0.}$$

Затем все остальные неизвестные компоненты вектора $\boldsymbol{\vec{u}}$ находим в порядке убывания их индекса, то есть следуя от номера $k = n-1$ до номера $k = 1$:

$$u_k = \frac{1}{u_{kk}}\Big(v_k - \sum_{j=k+1}^{n} u_{kj}u_j\Big), \qquad k = n-1, n-2, \ldots, 1.$$

Разумеется, для реализации указанной схемы численного решения необходимо предварительно знать матрицы-сомножители L и U в равенстве $A = LU$.

7^0. Справедлива следующая теорема, дающая достаточное условие существования разложения $A = L \cdot U$.

Теорема. *Если все главные миноры квадратной матрицы A отличны от нуля, то существует единственное разложение $A = LU$, в котором L — это нижняя треугольная матрица, $l_{ii} = 1$, $i = 1, 2, \ldots, n$, а U — верхняя треугольная матрица.*

Элементы матриц $\boldsymbol{L} = (l_{ij})$ и $\boldsymbol{U} = (d_{ij})$ находятся из матричного равенства $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$. Точнее, элемент a_{ij} матрицы $\boldsymbol{A}$ следует приравнять соответствующему элементу произведения

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & \cdots & d_{1n} \\ 0 & d_{22} & d_{23} & \cdots & d_{2n} \\ 0 & 0 & d_{33} & \cdots & d_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & d_{nn} \end{pmatrix}.$$

Матрица $\boldsymbol{A}$ здесь предполагается известной, а искомые величины — это:

$$\boldsymbol{l_{ij}} \quad \text{при} \quad \boldsymbol{i > j}, \qquad \text{а также} \quad \boldsymbol{d_{ij}} \quad \text{при} \quad \boldsymbol{i \le j}.$$

Специфика системы для отыскания матриц $\boldsymbol{L}$ и $\boldsymbol{U}$ позволяет получить ее решение последовательно осуществляя следующие шаги алгоритма.

$\mathbf{1}$ *шаг.* Из первой строки равенства $\boldsymbol{A = LU}$ находим

$$\boldsymbol{d_{1j} = a_{1j}, \quad j = 1, 2, \ldots, n.} \tag{$\mathbf{1}_s$}$$

$\mathbf{2}$ *шаг.* Приравнивая первые **столбцы** матриц $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{LU}$, получаем теперь:

$$\boldsymbol{l_{i1} = \frac{a_{i1}}{d_{11}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n.} \tag{$\mathbf{2}_s$}$$

$\mathbf{3}$ *шаг.* Приравнивая вторые **строки** матриц $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{LU}$, находим

$$\boldsymbol{d_{2j} = a_{2j} - l_{21}d_{1j}, \qquad j = 2, 3, \ldots, n.} \tag{3_s}$$

$\mathbf{4}$ *шаг.* Приравнивая вторые **столбцы** матриц $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{LU}$, находим:

$$\boldsymbol{l_{i2} = \frac{1}{d_{22}}\Big(a_{i2} - l_{i1}d_{12}\Big), \qquad i = 3, 4, \ldots, n.} \tag{4_s}$$

$(2n)$-*шаг.* Последним вычисляется элемент d_{nn} по формуле

$$d_{nn} = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} l_{nk} d_{kn}.$$

В общем виде полученные формулы для элементов матриц L и U записываются следующим образом:

$$d_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} d_{kj}, \qquad i \le j;$$

$$l_{ij} = \frac{1}{d_{ij}}\left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}d_{kj}\right), \qquad i > j.$$

8^0. Пусть матрица $A = (a_{ij})$ симметричная и положительно определенная, то есть удовлетворяет условию

$$(Au, u) > 0 \qquad \text{для любого вектора} \quad u \neq 0.$$

Тогда существует такая нижняя треугольная матрица $\boldsymbol{L}$, что $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\boldsymbol{T}}$.

Матрица $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{L}^{\boldsymbol{T}}$ — верхняя треугольная.

Элементы матрицы $\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{l}_{\boldsymbol{ij}})$ находим из матричного уравнения $\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{A}$, приравнивая соответствующие элементы матриц $\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\boldsymbol{T}}$ и $\boldsymbol{A}$.

В результате получим следующие равенства:

$$\begin{cases} l_{11}^2 = a_{11}, \\ l_{i1} \cdot l_{11} = a_{i1}, \qquad i = 2, 3, \ldots, n, \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{21}^2 + l_{22}^2 = a_{22}, \\ l_{i1} \cdot l_{21} + l_{i2} \cdot l_{22} = a_{22}, \qquad i = 3, 4, \ldots, n, \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{31}^2 + l_{32}^2 + l_{33}^2 = a_{33}, \\ l_{i1} \cdot l_{31} + l_{i2} \cdot l_{32} + l_{i3} \cdot l_{33} = a_{33}, \\ i = 4, 5, 6, \ldots, n, \end{cases}$$

и далее, последовательно увеличивая номер k определяющего уравнения:

$$\begin{cases} l_{k1}^2 + l_{k2}^2 + l_{k3}^2 + \ldots + l_{kk}^2 = a_{kk}, \\ l_{i1} \cdot l_{k1} + l_{i2} \cdot l_{k2} + l_{i3} \cdot l_{k3} + \ldots + l_{ik} \cdot l_{kk} = a_{kk}, \\ i = k+1,\, k+2,\, k+3,\, \ldots, n. \end{cases}$$

Последовательно решая эту систему приходим к формулам

$$\begin{cases} l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \\ l_{i1} = \dfrac{a_{i1}}{l_{11}}, \quad i = 2, 3, \ldots, n, \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{22} = \sqrt{a_{22} - l_{21}^2}, \\ \\ l_{i2} = \frac{a_{i2} - l_{i1} l_{21}}{l_{22}}, \qquad i = 3, 4, \dots, n, \end{cases}$$

$$\begin{cases} l_{33} = \sqrt{a_{33} - l_{31}^2 - l_{32}^2}, \\ \\ l_{i3} = \frac{a_{i3} - l_{i1} l_{31} - l_{i2} l_{32}}{l_{33}}, \qquad i = 4, 5, \dots, n. \end{cases}$$

Далее, последовательно увеличивая номер $\boldsymbol{k}$ определяющего уравнения, получаем

$$\begin{cases} l_{kk} = \sqrt{a_{kk} - l_{k1}^2 - l_{k2}^2 - l_{k3}^2 - \ldots - l_{k,k-1}^2}, \\ \\ l_{ik} = \dfrac{a_{ik} - l_{i1}l_{k1} - l_{i2}l_{k2} - l_{i3}l_{k3} - \ldots - l_{i,k-1}l_{k,k-1}}{l_{kk}}, \\ i = k+1, k+2, k+3, \ldots, n. \end{cases}$$

Здесь $k = 2, 3, 4, \ldots, n$.

Опасность при численной реализации этих

формул представляет возникновение отрицательного выражения под корнем. По условию матрица $\boldsymbol{A}$ симметрична и положительно определена и под корнем всегда должны быть неотрицательные значения. Но ошибки округления могут все испортить.

Решение системы

$$\boldsymbol{A\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}} \quad \Leftrightarrow \quad \boldsymbol{LL^T\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}}$$

сводится к последовательному решению двух линейных систем:

$$\boldsymbol{L\overrightarrow{v} = \overrightarrow{f}} \quad \text{и} \quad \boldsymbol{L^T\overrightarrow{u} = \overrightarrow{v}}.$$

Для решения первой системы $\boldsymbol{L\overrightarrow{v} = \overrightarrow{f}}$ справедливы следующие формулы:

$$\boldsymbol{v_1 = \frac{f_1}{l_{11}}}; \quad \boldsymbol{v_k = \frac{f_k - \sum\limits_{j=1}^{k-1} l_{kj}v_j}{l_{kk}}}, \quad \boldsymbol{k = 2, 3, \ldots, n.}$$

Для решения второй системы $L^T\overrightarrow{u} = \overrightarrow{v}$ применимы следующие формулы:

$$u_k = \frac{1}{l_{kk}}\Big(v_k - \sum_{j=k+1}^{n} l_{kj}u_j\Big), \qquad k = n-1, n-2, \ldots, 1.$$

Опасность при численной реализации этих формул — возможная близость к нулю элементов l_{ii} хотя бы для одного индекса i. Указанный метод решения СЛАУ называют методом квадратного корня, или методом Холецкого.

.

Тема : Итерационные методы решения СЛАУ

$\mathbf{1^0}$. Запись СЛАУ в эквивалентном виде с помощью оператора перехода. Метод простой итерации (МПИ). $\mathbf{2^0}$. Достаточное условие сходимости МПИ. Критерий сходимости МПИ. Количество операций. $\mathbf{3^0}$. Учет ошибок округления в методе простой итерации. $\mathbf{4^0}$. Метод Якоби: оператор перехода, достаточное условие сходимости, критерий сходимости. $\mathbf{5^0}$. Метод Зейделя: оператор перехода, рекуррентная схема вычислений, достаточное условие сходимости. $\mathbf{6^0}$. Метод верхней релаксации: оператор перехода, итерационный параметр. $\mathbf{7^0}$. Определение квадратичного функционала, функционала энергии. Вариационная задача минимизации квадратичного функционала и задача решения СЛАУ: теорема о минимуме квадратичного функционала.

1^0. Умножим обе части системы линейных уравнений $\boldsymbol{A}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \overrightarrow{\boldsymbol{f}}$ на скалярный множитель $\boldsymbol{\tau}$, а затем прибавим к обеим частям получившейся системы вектор $\overrightarrow{\boldsymbol{u}}$. В результате получим

$$\boldsymbol{\tau A}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{\tau}\overrightarrow{\boldsymbol{f}} \quad \Rightarrow \quad \overrightarrow{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{\tau A}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \overrightarrow{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{\tau}\overrightarrow{\boldsymbol{f}}.$$

Последнее равенство перепишем в эквивалентном виде

$$\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = (\boldsymbol{E} - \boldsymbol{\tau A})\overrightarrow{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{\tau}\overrightarrow{\boldsymbol{f}}.$$

Вводя обозначение $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{E} - \boldsymbol{\tau A}$, запишем полученную систему в общепринятой форме

$$\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{B}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} + \overrightarrow{\boldsymbol{F}}, \qquad \text{где} \qquad \overrightarrow{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{\tau}\overrightarrow{\boldsymbol{f}}.$$

Для решения такого типа операторных уравнений применяется метод последовательных приближений, или метод простой итерации:

$$\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k+1}} = \boldsymbol{B}\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k}} + \overrightarrow{\boldsymbol{F}}, \quad \boldsymbol{k = 0, 1, 2, \ldots.}$$

Для того чтобы запустить этот итерационный процесс, достаточно задать начальный вектор $\overrightarrow{u_0}$.

В качестве начального вектора $\overrightarrow{u}_0$ часто выбирают нулевой, то есть полагают $\overrightarrow{u}_0 = \overrightarrow{0}$.

При подстановке $\overrightarrow{u_0}$ в исходное уравнение возникает вектор невязки

$$\overrightarrow{r_0} = \overrightarrow{f} - A\overrightarrow{u}_0.$$

Вычислив невязку $\overrightarrow{r_0}$, можно уточнить приближение к решению, положив

$$\overrightarrow{r_1} = \overrightarrow{f} - A\overrightarrow{u}_1$$

и построив уточнение по формуле

$$\overrightarrow{u}_2 = \overrightarrow{u}_1 + \tau\overrightarrow{r_1}.$$

Эти построения легко продолжить с помощью рекуррентных соотношений

$$\begin{array}{c} \overrightarrow{u}_{k+1} = \overrightarrow{u}_k + \tau\overrightarrow{r_k}; \\ \overrightarrow{r_k} = \overrightarrow{f} - A\overrightarrow{u}_k; \end{array} \quad k = 0, 1, 2, \ldots .$$

Исключая из этих записей вектор $\overrightarrow{r_k}$, получаем то же самое матричное равенство

$$\overrightarrow{u}_{k+1} = B\overrightarrow{u_k} + \overrightarrow{F}, \qquad \text{где} \qquad B = E - \tau A,\ \overrightarrow{F} = \tau\overrightarrow{f}.$$

Решение системы $A\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}$ при этом рассматривается как предел последовательных приближений, то есть векторов

$$\overrightarrow{u_0}, \quad \overrightarrow{u_1}, \quad \overrightarrow{u_2}, \quad \ldots, \overrightarrow{u_k}, \quad \ldots,$$

при $k \to \infty$. Если предел такой последовательности существует, то говорят, что итерационный процесс сходится к решению СЛАУ $A\vec{u} = \vec{f}$.

2^0. Сформулируем достаточное условие сходимости метода простой итерации.

Теорема. *Пусть* $\|B\| = q < 1$. *Тогда итерационный процесс*

$$\vec{u}_{k+1} = B\vec{u}_k + \vec{F}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots \qquad (SS)$$

сходится к решению системы $A\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}$ со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q.

Доказательство. Пусть $A\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}$, то есть

$$\overrightarrow{u} = B\overrightarrow{u} + \overrightarrow{F}.$$

Вычитая из этого равенства соотношение (SS), получаем

$$\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}_{k+1} = B(\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}_k).$$

Пользуясь этим равенством, получаем следующую оценку сверху:

$$\|\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}_{k+1}\| \leq \|B\| \cdot \|\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u_k}\|.$$

Последовательно применяя ее несколько раз, придем к серии оценок

$$\|\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}_{k+1}\| \leq \|B\|^2 \cdot \|\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}_{k-1}\| \leqslant$$
$$\leq \|B\|^3 \cdot \|\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}_{k-2}\| \leqslant \ldots \leqslant \|B\|^k \cdot \|\overrightarrow{u} - \overrightarrow{u}_0\|.$$

Учитывая неравенство $\|\boldsymbol{B}\| = \boldsymbol{q} < 1$, заключаем, что $\lim\limits_{\boldsymbol{k}\to\infty} \|\overrightarrow{\boldsymbol{u}} - \overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k}+1}\| = \mathbf{0}$.

Это и означает, что последовательность векторов $\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k}}$ сходится к вектору $\overrightarrow{\boldsymbol{u}}$ по норме. Для достижения точности $\boldsymbol{\varepsilon}$ в приближении решения $\overrightarrow{\boldsymbol{u}}$ вектором $\overrightarrow{\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}}$ требуется взять

$$\boldsymbol{k} \geq \frac{\mathbf{1}}{\ln \boldsymbol{q}} \ln\left(\frac{\boldsymbol{\varepsilon}}{\|\overrightarrow{\boldsymbol{u}} - \overrightarrow{\boldsymbol{u}_{\mathbf{0}}}\|}\right).$$

$\square$

Замечание. *Оценка*

$$\|\vec{u} - \vec{u}_{k+1}\| \leq q^k \cdot \|\vec{u} - \vec{u}_0\|$$

означает, что при любом начальном приближении $\vec{u}_0$ *последовательные векторные приближения* $\vec{u}_k$ *сходятся по норме к решению* $\vec{u}$ *экспоненциально.*

Сформулируем критерий сходимости метода простой итерации.

Теорема. *Пусть система* $\boldsymbol{A\overrightarrow{u} = \overrightarrow{f}}$ *имеет единственное решение. Тогда итерационный процесс*

$$\boldsymbol{\overrightarrow{u}_{k+1} = B\overrightarrow{u}_k + \overrightarrow{F}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots}$$

сходится в том и только том случае, если все собственные значения матрицы $\boldsymbol{B}$ *по абсолютной величине меньше единицы.*

Замечание. *Метод Гаусса без выбора главного элемента требует $\approx \frac{2}{3}n^3$ арифметических действий. Метод простой итерации требует для такой же системы $\approx (2n^2)\cdot I$ арифметических действий, где I — число итераций, необходимое для достижения заданной точности.*

Следовательно, при $I < \frac{n}{3}$ МПИ предпочтительней метода Гаусса.

3^0. Оценим устойчивость МПИ по отношению к накоплению ошибок округления. Суммарный эффект ошибок округления при выполнении одного итерационного шага удобно учесть как некоторое возмущение правой части в итерационном процессе

$$\vec{u}_k = B\vec{u}_{k-1} + \vec{F}, \quad k = 1, 2, 3, \ldots . \qquad (SS')$$

Обозначим результат вычислений на k-ой итерации при наличии ошибок округления как $\overrightarrow{u_k^M}$.

Тогда в соответствии с принятым соглашением имеем:

$$\overrightarrow{\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{M}}} = B\overrightarrow{\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k-1}}^{\boldsymbol{M}}} + (\overrightarrow{\boldsymbol{F}} + \overrightarrow{\boldsymbol{\delta}}_{\boldsymbol{k}}),$$

где $\overrightarrow{\boldsymbol{\delta}}_{\boldsymbol{k}}$ — суммарная погрешность при округлениях.

Предполагая, что $\|B\| = q < 1$, имеем далее:

$$\|\overrightarrow{u_k^M} - \overrightarrow{u}_k\| \leq q\|\overrightarrow{u_{k-1}^M} - \overrightarrow{u}_{k-1}\| + \|\overrightarrow{\delta}_k\| \leqslant$$
$$\leq q^2\|\overrightarrow{u_{k-2}^M} - \overrightarrow{u}_{k-2}\| + q\|\overrightarrow{\delta}_{k-1}\| + \|\overrightarrow{\delta}_k\| \leqslant$$
$$\leq q^3\|\overrightarrow{u_{k-3}^M} - \overrightarrow{u}_{k-3}\| + q^2\|\overrightarrow{\delta}_{k-2}\| + q\|\overrightarrow{\delta}_{k-1}\| + \|\overrightarrow{\delta}_k\|.$$

Продолжая эту оценку, получим в итоге следующее неравенство:

$$\|\overrightarrow{u_k^M} - \overrightarrow{u}_k\| \leq q^k\|\overrightarrow{u_0^M} - \overrightarrow{u}_0\| + \Big(\max_{1\leq i\leq k} \|\overrightarrow{\delta_i}\|\Big) \sum_{j=0}^{k-1} q^j.$$

Здесь $k = 1, 2, 3, \ldots, I$.

Пусть начальное приближение задано точно, то есть $\|\overrightarrow{u_0^M} - \vec{u}_0\| = 0$. Тогда полученная оценка упрощается и принимает вид

$$\|\overrightarrow{u_k^M} - \vec{u}_k\| \le (\max_{1 \le i \le k} \|\overrightarrow{\delta_i}\|) \sum_{j=0}^{k-1} q^j.$$

Предположим, что правила округления при выполнении арифметических операций устроены таким образом, что норма вектора $\overrightarrow{\delta_j}$

возмущений не превосходит некоторого малого числа $\delta > 0$, одинакового для всех значений j. Тогда справедлива оценка

$$\max_{1 \leq i \leq \infty} \|\overrightarrow{\delta_i}\| \leq \delta.$$

Следовательно, для всех $k = 1, 2, \ldots, I$ имеет место неравенство

$$\|\overrightarrow{u_k^M} - \vec{u}_k\| \leq \frac{1 - q^k}{1 - q} \delta \leq \frac{\delta}{1 - q}.$$

Таким образом, погрешность, вносимая в решение из-за конечной разрядности мантиссы машинного числа, никак не зависит от количества итераций I.

Это позволяет утверждать, что в ряде случаев итерационные методы оказываются более устойчивыми к ошибкам округления, чем прямые методы.

4^0. Любая матрица $\boldsymbol{A}$ единственным образом представима в виде суммы

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{D} + \boldsymbol{U}, \tag{$\sum$}$$

где $\boldsymbol{L}$ — нижняя треугольная матрица с нулями на главной диагонали, $\boldsymbol{U}$ — верхняя треугольная матрица с нулями на главной диагонали, а $\boldsymbol{D}$ — диагональная матрица,

$$\boldsymbol{D} = \operatorname{diag}\{a_{11},\, a_{22},\, a_{33},\, \ldots,\, a_{nn}\}.$$

Используя разложение ($\sum$), запишем систему $\boldsymbol{A}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \overrightarrow{\boldsymbol{f}}$ в эквивалентном виде:

$$\boldsymbol{L}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{D}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} + \boldsymbol{U}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \overrightarrow{\boldsymbol{f}}. \qquad (\boldsymbol{I'})$$

В левой части равенства ($\boldsymbol{I'}$) расставим нижние индексы у вектора $\overrightarrow{\boldsymbol{u}}$ следующим образом:

$$\boldsymbol{L}\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k}} + \boldsymbol{D}\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k+1}} + \boldsymbol{U}\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k}} = \overrightarrow{\boldsymbol{f}}. \qquad (\boldsymbol{Ja})$$

Полагая здесь $k = 0, 1, 2, \ldots$ и задавая начальный вектор $\vec{u}_0$, получаем итерационный процесс.

Предположив, что диагональная матрица D невырождена, то есть что

$$a_{ii} \neq 0, \quad i = 1, 2, 3, \ldots,$$

запишем итерационный процесс ($\boldsymbol{Ja}$) в нормальной явной форме (типа формы ($\boldsymbol{SS'}$)):

$$\overrightarrow{u}_{k+1} = -D^{-1}(L+U)\overrightarrow{u}_k + D^{-1}\overrightarrow{f}, \qquad (Ja+)$$

где $k = 0, 1, 2, \ldots$. Нахождение последовательных приближений

$$\overrightarrow{u}_1, \quad \overrightarrow{u}_2, \quad \overrightarrow{u}_3, \quad \ldots, \overrightarrow{u}_k, \ldots$$

с помощью рекуррентных соотношений ($\boldsymbol{Ja+}$) называется *методом Якоби*.

Полагая $\boldsymbol{B} = -\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})$ и $\overrightarrow{\boldsymbol{F}} = \boldsymbol{D}^{-1}\overrightarrow{\boldsymbol{f}}$, запишем систему $(\boldsymbol{Ja+})$ в виде

$$\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k}+1} = \boldsymbol{B}\overrightarrow{\boldsymbol{u}}_{\boldsymbol{k}} + \overrightarrow{\boldsymbol{F}}.$$

Матрица $\boldsymbol{B} = -\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})$ в этой системе, как легко заметить, имеет нули на своей главной диагонали и поэлементно записывается в следующем виде:

$$\begin{bmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} & \cdots & -\frac{a_{1,n}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} & \cdots & -\frac{a_{2,n}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 & \cdots & -\frac{a_{3,n}}{a_{33}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -\frac{a_{n-1,1}}{a_{n-1,n-1}} & -\frac{a_{n-1,2}}{a_{n-1,n-1}} & -\frac{a_{n-1,3}}{a_{n-1,n-1}} & \cdots & -\frac{a_{n-1,n}}{a_{n-1,n-1}} \\ -\frac{a_{n,1}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n,2}}{a_{nn}} & -\frac{a_{n,3}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{bmatrix}.$$

Именно это соответствие матрицы $\boldsymbol{A}$ системы и оператора перехода $\boldsymbol{B}$ отличает метод Якоби от МПИ.

Теорема (достаточное условие сходимости метода Якоби). *Пусть матрица* $\boldsymbol{A}$ *системы* $\boldsymbol{A}\overrightarrow{\boldsymbol{u}} = \overrightarrow{\boldsymbol{f}}$ *имеет строгое диагональное преобладание, то есть*

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \qquad i = 1, 2, \ldots, n. \qquad (CC)$$

Тогда итерационные приближения по методу Якоби ($Ja+$) *сходятся к решению* $\vec{u}$ *этой СЛАУ.*

Доказательство. Как следует из условия (CC) и общего вида матрицы B в итерационном методе Якоби, имеют место неравенства

$$\sum_{j=1}^{n} |b_{ij}| = \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}| < 1, \qquad i = 1, 2, \ldots, n.$$

Следовательно, для нормы $\|B\|_\infty$ справедливо соотношение

$$\|B\|_\infty = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1}^{n} |b_{ij}| = q < 1.$$

Как уже было доказано, условие $\|B\|_\infty < q$ достаточно для сходимости последовательности приближений $\overrightarrow{u_k}$ к решению $\overrightarrow{u}$ по норме $\|\cdot\|_\infty$, то есть $\lim\limits_{k\to\infty} \|\overrightarrow{u}_k - \overrightarrow{u}\|_\infty = 0.$ $\square$

Теорема (критерий сходимости метода Якоби). *Итерационный метод Якоби сходится тогда и только тогда, когда все корни $\boldsymbol{\lambda}$ уравнения*

$$\det\begin{pmatrix} \lambda a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \lambda a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & \lambda a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \cdots & \lambda a_{nn} \end{pmatrix} = 0 \qquad (\boldsymbol{E_q})$$

по модулю меньше единицы.

Доказательство. Из приведенного выше общего вида матрицы $\boldsymbol{B}$ итерационного процесса Якоби следует, что определитель в левой части равенства ($\boldsymbol{E_q}$) равен следующему произведению:

$$(-1)^{\boldsymbol{n}}\Big(\prod_{\boldsymbol{j=1}}^{\boldsymbol{n}} \boldsymbol{a_{jj}}\Big)\,\mathbf{det}\,[\boldsymbol{B}-\boldsymbol{\lambda E}].$$

Таким образом, все корни $\boldsymbol{\lambda}$ уравнения ($\boldsymbol{E_q}$) — это собственные числа матрицы $\boldsymbol{B}$. Следовательно, уравнение ($\boldsymbol{E_q}$) эквивалентно следующему характеристическому уравнению с матрицей $\boldsymbol{B}$:

$$\mathbf{det}\,[\boldsymbol{B} - \boldsymbol{\lambda} \boldsymbol{E}] = \mathbf{0}.$$

Заметим, что

$$\boldsymbol{B} - \boldsymbol{\lambda E} = -\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}) - \boldsymbol{\lambda E} = -\boldsymbol{D}^{-1}[(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}) + \boldsymbol{\lambda D}].$$

Следовательно, $\mathbf{det}\,[\boldsymbol{B} - \boldsymbol{\lambda E}]$ тогда и только тогда равен нулю, когда

$$\mathbf{det}\,[(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{U})+\boldsymbol{\lambda D}]=\mathbf{0.}$$

По сформулированному ранее критерию метод простой итерации ($\boldsymbol{Ja}+$) с матрицей $\boldsymbol{B}$ сходится тогда и только тогда когда собственные числа матрицы $\boldsymbol{B}$ по модулю строго меньше 1. $\square$