ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ

Основные прямые и итерационные методы решения СЛАУ: Гаусса и его разновидности, отражений, вращений, простой итерации, Якоби, Зейделя, Гаусса-Зейделя, релаксации.

Рассмотрим задачу решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ)

Ax=b.

где A является матрицей порядка n, векторы x и b являются n-мерными векторами. Предполагается, что определитель матрицы A отличен от нуля, так что решение x существует и единственно.

К решению СЛАУ сводится подавляющее большинство задач вычислительной математики. Методы решения СЛАУ принято разделять на прямые (другое название – точные) и итерационные.

Метод решения СЛАУ относят к классу прямых, если он позволяет получить решение в точном виде после конечного числа операций, выполняемых без округлений (т.е. фактически речь идет об отсутствии погрешности метода). В случае итерационных методов точное решение можно получить лишь в пределе некоторого бесконечного процесса. В настоящее время можно говорить о том, что точные методы применяются при решении систем до порядка 10^6 , итерационные — до порядка 10^{10} . При большем порядке используются вероятностные методы типа Монте-Карло.

В качестве основных прямых методов назовем метод Гаусса, метод на основе разложения симметричных матриц, метод прогонки, метод отражений метод вращений. В качестве основных итерационных методов назовем метод простой итерации, метод Якоби, Зейделя, Гаусса-Зейделя, метод релаксации.

Основные прямые методы решения СЛАУ

Метод Гаусса без выбора ведущего элемента состоит в том, что сначала система уравнений приводится к треугольному виду элементарными строчными преобразованиями без использования перестановки строк и/или столбцов (прямой ход), а затем неизвестные выражаются из полученной системы (обратный ход). Такая вычислительная схема накладывает некоторые ограничения на СЛАУ: для допустимости вычислений необходимо и достаточно отличие от нуля всех угловых миноров матрицы.

Метод Гаусса тесно связан с так называемым LU-разложением матрицы системы. LU-разложением матрицы A называется её представление в виде A=LU, где L — нижняя треугольная матрица с единичной диагональю, U — верхняя треугольная матрица с ненулевыми диагональными элементами.

Теорема об LU-разложении: Для того чтобы существовало LU-разложение матрицы A необходимо и достаточно отличие от нуля всех её угловых миноров. LU-разложение единственно.

Применение метода Гаусса к системе Ax=b допускает следующую реализацию: получение LU-разложения A=LU, решение системы Ly=b с нижней треугольной матрицей, решение системы Ux=y с верхней треугольной матрицей.

Алгоритм исключений Гаусса является неустойчивым: в случае относительной малости ведущего элемента (диагонального элемента преобразуемой матрицы, ниже которого обнуляются элементы столбца) процесс вычислений приводит к накоплению погрешностей.

Преодолеть этот недостаток в значительной мере можно путем включения в алгоритм метода исключений схемы выбора ведущего элемента по строке, по столбцу или по всей преобразуемой подматрице. В качестве главного выбирается наибольший по модулю элемент. Наиболее используемым на практике является вариант с выбором главного элемента по столбцу. Схемы выбора ведущего элемента не гарантируют устойчивость (т.е. низкую чувствительностью к погрешностям вычислений) метода Гаусса, но в значительной степени уменьшают влияние вычислительной погрешности на отклонение полученного результата от настоящего решения задачи.

Вычислительная сложность (требуемое для выполнения алгоритма число арифметических операций умножения и деления) метода Гаусса составляет величину порядка $\frac{1}{3}n^3$.

Если рассмотреть симметричную $(A=A^T)$ матрицу, то можно осуществлять LU-разложение (так называемое LDL^T-разложение) и решать системы Ax=b с меньшими, чем в общем случае, вычислительными затратами: требует порядка $\frac{1}{6}n^3$ операций (умножения и деления).

Этапы получения решения для случая LDL^T-разложения: получение разложения $A = LDL^T$, решение системы Ly = b с нижней треугольной матрицей; решение системы Dz = y с диагональной матрицей; решение системы $L^Tx = z$ с верхней треугольной матрицей.

Ещё одна из важнейших для приложений разновидность метод Гаусса – метод прогонки. Метод прогонки есть метод Гаусса без выбора ведущего элемента, примененный к системе уравнений с трехдиагональной матрицей.

Алгоритм метода прогонки для решения СЛАУ состоит из двух этапов: прямая прогонка — вычисление прогоночных коэффициентов, обратная прогонка — вычисление решения. Прогонка относится к алгоритмам с линейной сложностью

Метод прогонки применяется, если матрица A обладает свойством диагонального преобладания по строкам. Диагональное преобладание означает, что в каждой строке сумма абсолютных значений всех элементов вне главной диагонали меньше (строгое преобладание) или равна абсолютной величины диагонального элемента. На практике часто (например, при решении сеточных задач) матрица A обладает свойством диагонального преобладания. Для применимости метода прогонки хотя бы в одной строке преобладание должно быть строгим.

Метод отражений, называемый также методом Хаусхолдера, используется для получения так называемого QR-разложения квадратной матрицы порядка n и для решения систем линейных алгебраических уравнений. QR-разложением (или ортогональным разложением) матрицы A называется её представление в виде A = QR, где Q — ортогональная матрица, R — верхняя треугольная матрица.

Метод отражений, как и метод Гаусса, состоит в том, что сначала система уравнений приводится к треугольному виду, а затем неизвестные выражаются из полученной системы. В отличие от метода Гаусса, система уравнений приводится к треугольному виду посредством ортогональных преобразований, задаваемых так называемыми матрицами отражений.

Метод отражений требует порядка $\frac{2}{3}n^3$ операций умножения и деления; вычислительная сложность при больших n примерно в 2 раза больше, чем вычислительная сложность метода Гаусса. Тем не менее, методы решения СЛАУ, основанные на ортогональных преобразованиях, также используются на практике, так как обладают важным достоинством: преобразования посредством ортогональных матриц не увеличивают число обусловленности $v(A) = ||A|| \cdot ||A^{-1}||$ исходной системы, а чем меньше число обусловленности, тем вычисления более устойчивы. Прямой ход метода Гаусса приводит к ухудшению обусловленности исходной системы и обратный ход может сопровождаться большой потерей точности.

Метод вращений, называемый также методом Гивенса, используется, как и метод отражений, для получения QR-разложения квадратной матрицы порядка *п* и для решения систем линейных алгебраических уравнений. Преобразуемая матрица приводится, столбец за столбцом, к треугольному виду с помощью ортогональных матриц, которые носят название матриц вращения. Решение СЛАУ сводится к следующим этапам: преобразовать исходную систему Ax=f и получить систему с верхней треугольной матрицей; решить систему с верхней треугольной матрицей, т.е. выполнить обратный ход, аналогичный обратному ходу метода Гаусса. Метод вращений, как и метод отражений, обладает важным достоинством: преобразования матрицы, осуществляемые увеличивают при реализации метода, не число обусловленности матрицы.

Метод вращений требует порядка $\frac{4}{3}n^3$ операций умножения и деления. Вычислительная сложность при больших n примерно в 2 раза больше, чем вычислительная сложность метода Хаусхолдера (и в 4 раза больше, чем вычислительная сложность метода Гаусса). Тем не менее, метод Гивенса также используется на практике.

Основные итерационные методы решения СЛАУ

Пусть система Ax=f каким-либо способом приведена к так называемому виду, пригодному (говорят ещё удобному, подходящему) для итераций:

$$x=Bx+b$$
.

Метод простой итерации состоит в следующем: выбирается вектор $x^{(0)}$ (например, $x^{(0)}$ =0 или $x^{(0)}$ =b) и строится последовательность векторов по формуле

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + b$$
.

Если эта последовательность сходится, т.е. $x^{(k)} \rightarrow x^{(\infty)}$ при $k \rightarrow \infty$, то это предельное значение $x^{(\infty)}$ будет решением нашей системы. Действительно, переходя к пределу в равенстве $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + b$, получим $x^{(\infty)} = Bx^{(\infty)} + b$.

Критерий сходимости: Для того чтобы метод простой итерации сходился при любом начальном приближении $x^{(0)}$, необходимо и достаточно, чтобы все собственные значения матрицы B были по модулю меньше единицы.

Этот критерий не очень удобен для практического применения, так как требует информации о собственных значениях матрицы B. Можно сформулировать более простой достаточный признак сходимости:

Для того чтобы метод простой итерации сходился при любом начальном приближении $x^{(0)}$, достаточно, чтобы какая-либо норма матрицы B была меньше единицы.

Скорость сходимости:

Eсли ||B|| < 1, метод простой итерации сходится со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем, равным ||B||.

Самым известным и применяемым на практике частным случаем метода простой итерации является метод Якоби:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, ..., n, \ k = 0, 1, 2, ...$$

Для того чтобы привести матрицу A к виду, пригодному итераций, каждое уравнение следует разрешить относительно неизвестного, стоящего при диагональном элементе.

Если матрица А обладает свойством строгого диагонального преобладания, то метод Якоби сходится со скоростью геометрической прогрессии, причем чем строже диагональное преобладание, тем быстрее сходимость.

Как уже отмечалось, на практике часто матрица A обладает свойством строгого диагонального преобладания.

В методе Зейделя вычисления похожи на вычисления метода простой итерации, но, в отличие от метода простой итерации, каждая координата (k+1)-го приближения сразу после получения (т.е. уже «уточненная») используется для вычисления («уточнения») следующих координат. Для применения метода Зейделя, как и для применения метода простой итерации, система Ax=f должна быть приведена к виду, пригодному для итераций x=Bx+b.

Пусть матрица A обладает свойством диагонального преобладания по строкам. Применим тот же способ получения матрицы B и вектора b, который

приводит метод простой итерации к методу Якоби. Метод Зейделя с такой матрицей B и таким вектором b называется методом Гаусса-Зейделя:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, ..., n, k = 0, 1, 2, ...$$

Метод Гаусса-Зейделя является аналогом метода Якоби. В отличие от метода Якоби, каждая координата (k+1)-го приближения сразу после получения используется для вычисления следующих координат.

Пусть диагональное преобладание в каждой строке матрицы А строгое. Тогда метод Гаусса-Зейделя сходится со скоростью геометрической прогрессии, причем чем строже диагональное преобладание, тем быстрее сходимость.

Рассмотрим взвешенную сумму текущего приближения и приближения, построенного по методу Гаусса—Зейделя:

$$x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right),$$

$$i = 1, 2, ..., n, k = 0, 1, 2, ...$$

Это алгоритм, который в литературе называют методом последовательной верхней релаксации, SOR-методом (SOR – successive over relaxation). Метод последовательной верхней релаксации является одним из наиболее широко используемых на практике методов решения СЛАУ.

При ω =1 метод релаксации есть метод Гаусса–Зейделя. На практике обычно 1< ω <2, так как часто именно в таких пределах находится оптимальное значение ω , обеспечивающее наиболее быструю сходимость.

На практике окончание итераций при использовании итерационных методов определяется либо максимальным заданным числом итераций $k_{\rm max}$, либо условием

$$\max_{1\leq i\leq n}\left|x_i^{(k+1)}-x_i^{(k)}\right|<\varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ – заданное число.