Курс "Методы решения СЛАУ"



ФОНД целевого Капитала Кузнецов А.А. Петров Д.А.

Методы решения систем линейных алгебраических уравнений

Системы уравнений. Прямые методы

Кузнецов Александр kuznetsov.aa@mipt.ru

Системы уравнений

Опр. Системой линейных алгебраических уравнений назовем матричное равенство вида:

$$A x = b$$

где A - матрица размеров (m, n),

b - известный столбец размера m,

x - неизвестный столбец размера n,

m, *n* суть натуральные числа

Здесь и далее, если не оговорено обратное, положим:

- $1) \quad n=m$
- 2) det(A) != 0 существует и притом единственное решение

Виды решателей СЛАУ

Прямые методы Методы Гаусса Разложения (LU, QR, SVD и пр.) Метод прогонки

Итерационные методы Простейшие итерационные Минимизация функционала Проекционные методы Многосеточные методы

Метод Гаусса. Прямой ход

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix} - \underbrace{ \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & \widetilde{a}_{22} & \dots & \widetilde{a}_{2n} & \widetilde{b}_2 \\ 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \widetilde{a}_{n2} & \dots & \widetilde{a}_{nn} & \widetilde{b}_n \end{pmatrix} }_{a_{n1}}$$

(N + 1) операций умножения + (N + 1) операций сложения для каждой строки 2*(N + 1)*(N - 1) операций для первого столбца

Метод Гаусса. Прямой ход

Если на диагонали (i, i) встречается нуль, то под ним обязательно есть ненулевой элемент (j, i), причем j > i,

иначе *i* -ый столбец можно разложить по первым *i - 1* Поменяем местами строки *i* и *j*

Метод Гаусса. Прямой ход

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \ddots & \widetilde{b}_1 \\ 0 & \widetilde{a}_{22} & \dots & \dots & \widetilde{b}_2 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \widetilde{a}_{nn} & \widetilde{b}_n \end{pmatrix}$$
 Арифметических операция для прямого хода:
$$2 \, (N+1) \, (N-1) \, + \, 2 \, (N) \, (N-2) \\ + \, \dots + \, 2 \cdot 3 \cdot 1 = 2 / 3 N^3 + O \big(N^2 \big)$$

$$2(N+1)(N-1) + 2(N)(N-2) + ... + 2 \cdot 3 \cdot 1 = 2/3N^3 + O(N^2)$$

Метод Гаусса. Обратный ход

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots & \widetilde{b}_{1} \\ 0 & \widetilde{a}_{22} & \dots & \dots & \widetilde{b}_{2} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \widetilde{a}_{nn} & \widetilde{b}_{n} \end{pmatrix} - (n) \cdot a_{2n} / a_{nn} \begin{pmatrix} \widehat{a}_{11} & \widehat{a}_{12} & \dots & 0 & \widehat{b}_{1} \\ 0 & \widehat{a}_{22} & \dots & 0 & \widehat{b}_{2} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \widetilde{a}_{nn} & \widehat{b}_{n} \end{pmatrix}$$

4 N операций на последний столбец

Метод Гаусса. Обратный ход

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \widetilde{b}_1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & \widetilde{b}_2 \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & \widetilde{b}_n \end{pmatrix}$$
 Решение СЛАУ завершено

Не более $O(N^2)$ на весь обратный ход

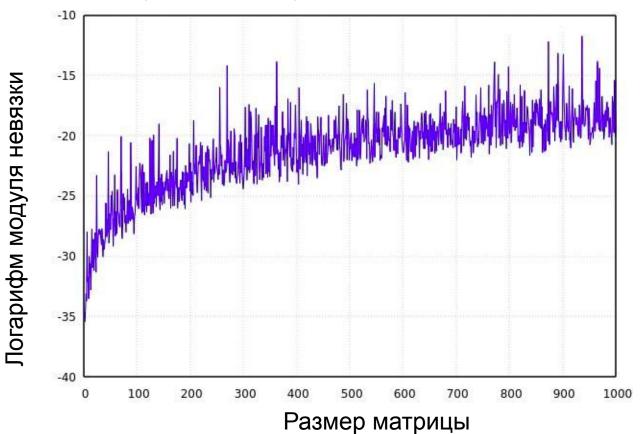
Метод Гаусса. Обсуждение

Сложность алгоритма: $2/3 N^3 + O(N^2)$

Использование: СЛАУ небольших размеров N < 10

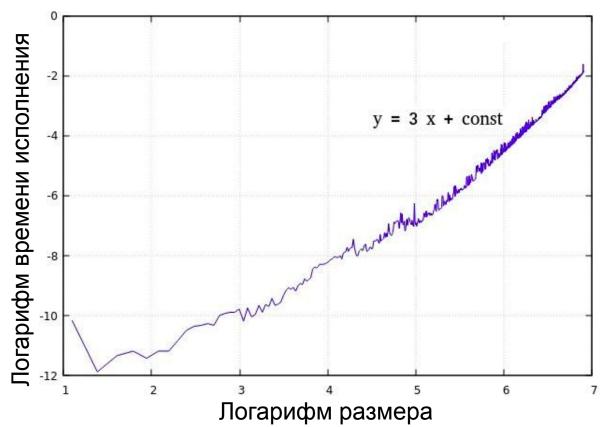
Решение точное? - Ха-Ха! Как бы не так ...

Метод Гаусса. Обсуждение



Невязка r = b - Ax

Метод Гаусса. Обсуждение



Сложность $\sim N^3$ In(Сложность) ~ 3 In(N)

Опр. Ошибкой округления **є** назовем такое наибольшее положительное число, что в памяти компьютера

$$1 + \varepsilon = 1$$

32 - битное число в памяти компьютера:

5 - ЗНак

f - мантисса

е - экспонента

S	f	e
1	23	8

32 - битное число в памяти компьютера:

S	f	e
1	23	8

Формула для перевода:

$$(-1)^s (1+f\cdot 2^{-23}) \ 2^{(e-127)}$$
 f - мантисса e - экспонента

s - 3Hak

Число 2

Число 2⁻²³

32 - битное число в памяти компьютера:

S	f	e
1	23	8

Число $2 + 2^{-23}$

+

=

0 0000000000000000000001 1000000 - достигнут предел точности!

Замечания:

1) ε - относительная величина! Чило 1000 имеет ошибку 1000 ε

2) При складывании чисел одного порядка ошибка удваивается:

$$1+1=1+\varepsilon+1+\varepsilon=2+2\varepsilon$$

3) При складывании чисел разных порядков ошибка меняется мало:

$$1000 + 1 = 1000 + 1000 \varepsilon + 1 + \varepsilon = 1001 + 1001 \varepsilon$$

Пример (округление в большую сторону):

$$(2 + 2^{-24}) + (2 + 2^{-24})$$
:

- 0 0000000000000000000000**1** 1000000
- +
- 0 000000000000000000000**1** 1000000
- =

Погрешность удвоилась!

Пример (округление в большую сторону):

$$(1024 + 2^{-14}) + (2 + 2^{-24})$$
:

0 00000000000000000000000**1** 1001010

+

=

0 0000000000000000000000**1** 1001010

+

0 000000000<mark>0</mark>000000000000**0** 1001010

=

0 00000000000000000000000**1** 1001010

Погрешность не изменилась!

Мысленно привели к одной экспоненте!

Метод Гаусса с выбором главного элемента

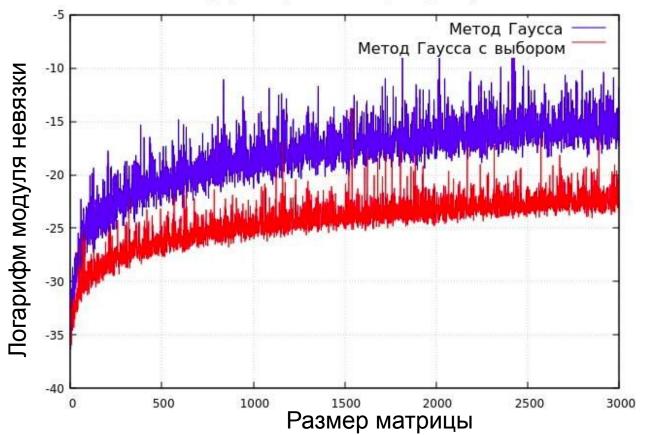


Арифметические операции производятся с числами, больше различающимися по порядку величины!

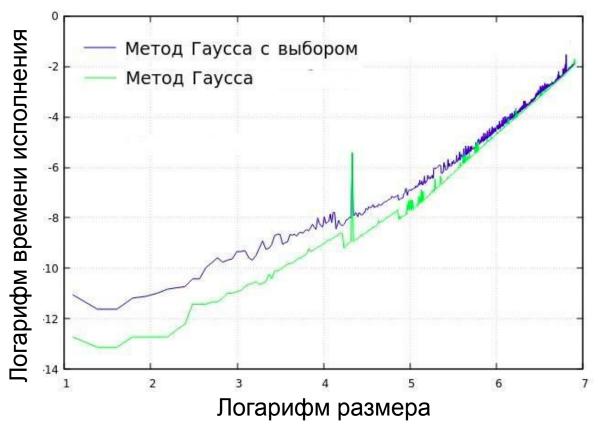
Сложность алгоритма:
$$2/3 N^3 + O(N^2)$$

Использование: СЛАУ небольших размеров *N* < *10* **СЛАУ с заполненными матрицами больших размеров - спорно**

Решение точное? - на порядки точнее, чем у классического метода Гаусса



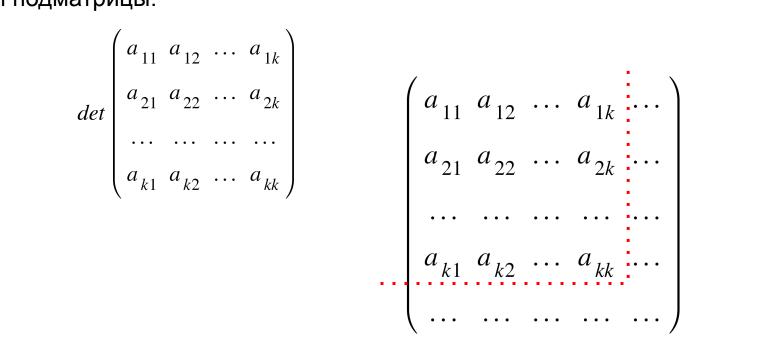
Невязка r = b - Ax



Сложность $\sim N^3$ In(Сложность) ~ 3 In(N)

Опр. Главным минором матрицы A порядка $k \le n$ называется детерминант следующей подматрицы:

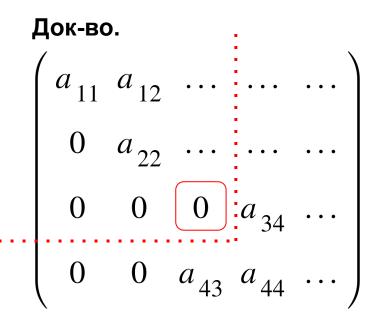
$$det \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1k} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{k1} & a_{k2} & \dots & a_{kk} \end{pmatrix}$$



Утв. Если все главные миноры ненулевые, то операция **swap** не встречается в методе Гаусса

Док-во.

- 1) Элемент (1, 1) ненулевой. При работе с первым столбцом операция **swap** не происходит
- 2) Если до работы со столбцом і swap не производился, то і-ый главный минор не изменился (к нему прибавлялись или вычитались строки умноженные на число из него самого)



Элемент (*i*, *i*) не может быть нулевым, так как иначе *i*-ый главный минор равен нулю (разложение минора по последней строке).

Операция **swap** на i-ом шаге не выполнятся

Доказано

Утв. Для матрицы A сложение j-ой строки, умноженной на d != 0, с i-ой строкой можно записать в виде:

$$A_{new} = S \cdot A$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Аналогично можно произвести обратные преобразования строк с верхнедиагональной матрицей U, получаемой при прямом ходе Гаусса, и получить исходную матрицу:

$$S_1 \cdot S_2 \cdot \ldots \cdot U = A$$

Матрицы $S_1, S_2 \dots$ при этом нижнедиагональные, а на главной диагонали имеют единицы, и при их умножении друг на друга они остаются таковыми. Их произведение обозначим L

Таким образом доказана

Теорема. Пусть у матрицы A все главные миноры ненулевые, тогда она представима в виде произведения матриц L и U единственным образом, где:

$$A = L \cdot U; \ L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & \dots & 1 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix}; \ U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{n-1n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_{nn} \end{pmatrix}$$

Единственность разложения следует из явных формул для элементов L и U, которые получаются из равенства:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{22} & \dots & \dots & a_{n1} \\ a_{21} & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & \dots & \dots & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & 0 & 0 \\ l_{31} & \dots & 1 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ \vdots & \dots & \dots & \dots & 1 & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{n-1n} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$u_{ij} = a_{ij} - \begin{pmatrix} j-1 \\ k=1 \end{pmatrix} l_{ik} u_{kj}, \quad i \leq j;$$

$$\int_{i}^{j-1} \left(\sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj} \right), \ i \leqslant j;$$

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

Теперь рассмотрим СЛАУ:

$$A x = b$$

Выполним для матрицы *A LU* разложение:

$$L(Ux) = b$$

Заменим задачу эквивалентной:

$$Lz = b; Ux = z$$

Обе системы решаются обратным ходом Гаусса за $O(N^2)$

LU разложение. Обсуждение

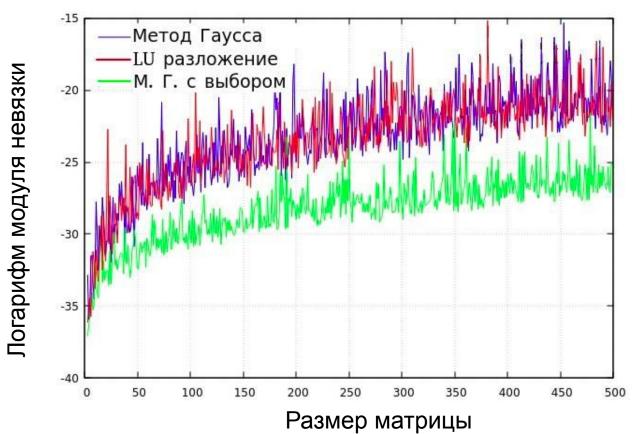
Сложность алгоритма:
$$2/3 N^3 + O(N^2)$$

Использование: Аналогично методу Гаусса, предобуславливание

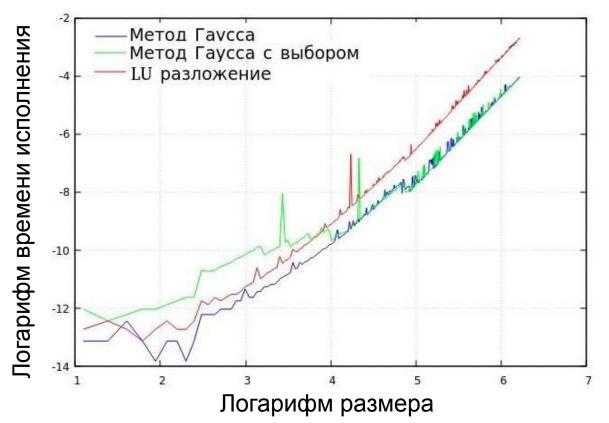
Решение точное? - точность совпадает с обычным методом Гаусса

В отличие от метода Гаусса практически обращает матрицу - **решение для новой правой части можно получить за O(N²)** при готовом разложении.

LU разложение. Обсуждение



Невязка r = b - Ax



Сложность $\sim N^3$ In(Сложность) ~ 3 In(N)

Разложение Холецкого

Пусть матрица системы А имеет положительные главные миноры и является симметричной. Тогда:

$$A = L \cdot U = A^T = (L \cdot U)^T = U^T \cdot L^T$$

Из единственности *LU* разложения следует, что:

$$U = L^T$$

А значит, справедливо разложение Холецкого:

$$A = L \cdot L^T$$

Разложение Холецкого

Из равенства

$$A = L \cdot L^T$$

можно выписать явные формулы для элементов I_{ii} матрицы L

$$\begin{split} l_{11} &= \sqrt{a_{11}}; \\ l_{i1} &= {^a}_{i1} / l_{11}, \ i = 2, \ \dots, \ n \\ l_{22} &= \sqrt{a_{22} - l_{21}^2} \\ l_{i2} &= \left({^a}_{i2} - l_{i1} l_{21} \right) / l_{22}, \ i = 3, \dots, \ n \\ l_{kk} &= \sqrt{a_{kk} - l_{k1}^2 - l_{k2}^2 - \dots - l_{kk-1}^2} \\ l_{ik} &= \left({^a}_{ik} - l_{ik} l_{k1} - l_{i2} l_{k2} - \dots - l_{i(k-1)} l_{k(k-1)} \right) / l_{kk}, \ i = k+1, \ \dots, \ n \end{split}$$

Разложение Холецкого. Обсуждение

Сложность алгоритма:
$$1/3 N^3 + O(N^2)$$

Использование: Для плотных симметричных матриц, **предобуславливание**

Решение точное? - точность совпадает с обычным методом Гаусса

В отличие от метода Гаусса практически обращает матрицу - **решение для новой правой части можно получить за O(N²)** при готовом разложении.

Опр. Матрицей перехода от старого базиса $\{e_i\}_{i=1}^N$ к новому базису $\{g_i\}_{i=1}^N$ называется матрица, в столбцах которой стоят координаты векторов нового базиса в старом базисе

Алгоритм ортогонализации (Грам - Шмидт)

При помощи алгоритма:

$$\boldsymbol{h}_{i} = \boldsymbol{e}_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\left(\boldsymbol{e}_{i} \cdot \boldsymbol{h}_{j}\right)}{\left(\boldsymbol{h}_{j} \cdot \boldsymbol{h}_{j}\right)} \boldsymbol{h}_{j}, i = 1, \dots, n$$

можно получить ортогональный базис $\{\boldsymbol{h}_i\}_{i=1}^N$

$$\boldsymbol{h}_{i} = \boldsymbol{e}_{i} - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{\left(\boldsymbol{e}_{i} \cdot \boldsymbol{h}_{j}\right)}{\left(\boldsymbol{h}_{i} \cdot \boldsymbol{h}_{j}\right)} \boldsymbol{h}_{j}, i = 1, \dots, n$$

Вектор h_i является линейной комбинацией векторов $\{e_1, e_2, ..., e_i\}$. Поэтому в i-ом столбце матрицы перехода (i+1)-ый и далее элементы нулевые.

Матрица перехода S от $\{e_i\}_{i=1}^N \kappa \{h_i\}_{i=1}^N$ верхнетреугольная.

$$S = \begin{pmatrix} 1 & \dots & \dots \\ 0 & 1 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Для получения ортонормированного базиса каждый вектор $\{h_i\}_{i=1}^N$ стоит разделить на свою норму (длину).

Полученный ОНБ $\{g_i\}_{i=1}^N$ связан с $\{h_i\}_{i=1}^N$ при помощи диагональной матрицы.

Матрица перехода от $\{e_i\}_{i=1}^N$ к ОНБ $\{g_i\}_{i=1}^N$ - верхнетреугольная

Опр. Матрица Q называется ортогональной, если:

$$Q^T = Q^{-1}$$

Утв. Ортогональные матрицы и только они являются матрицами перехода между ОНБ

Теорема. Любую невырожденную матрицу A можно представить в виде произведения ортогональной Q и верхнетреугольной R **Док-во.**

Пусть столбцы A - координатные столбцы системы базиса $\{w_i\}_{i=1}^N$ в ОНБ $\{e_i\}_{i=1}^N$:

$$\left(\begin{array}{cccc} w_1 & w_2 & \dots & w_n \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cccc} e_1 & e_2 & \dots & e_n \end{array}\right) \cdot A$$

Теперь ортогонализуем систему векторов $\{w_i\}_{i=1}^N$, R - верхнетреугольная, $\{g_i\}_{i=1}^N$ - ОНБ:

$$\left(\begin{array}{cccc} w_1 & w_2 & \dots & w_n \end{array}\right) = \left(\begin{array}{cccc} g_1 & g_2 & \dots & g_n \end{array}\right) \cdot R$$

Теорема. Любую невырожденную матрицу A можно представить в виде произведения ортогональной Q и верхнетреугольной R

$$\{g_i\}_{i=1}^N$$
 и $\{e_i\}_{i=1}^N$ связаны ортогональной матрицей Q

$$\left(\begin{array}{ccc} e_1 & e_2 & \dots & e_n \end{array}\right) \cdot Q \cdot R = \left(\begin{array}{cccc} e_1 & e_2 & \dots & e_n \end{array}\right) \cdot A$$

Откуда
$$A = Q R$$

Доказано

Для решения СЛАУ нужно при помощи обратного хода Гаусса разрешить:

$$R \cdot x = Q^T b$$

QR разложение. Обсуждение

Сложность алгоритма: $5/2 N^3 + O(N^2)$ Ортогонализация

 $O(N^3)$ Разложение векторов по базису

Использование: НИКОГДА!!!

Точность: Алгоритм ортогонализации дает неточную ортогональную матрицу из-за ошибок округления

Решение - другой алгоритм!

Оператор отражения, относительно плоскости с нормалью *v*:

$$P = I - \frac{2}{v^T \cdot v} v \cdot v^T$$

$$P \cdot x = I \cdot x - \frac{2}{v^T \cdot v} v \cdot v^T \cdot x = x - 2 \frac{(v \cdot x)}{(v \cdot v)} v$$

P - симметричный и сам себе обратный (по смыслу), поэтому ортогональный.

Пусть \mathbf{e}_{1} , - первый базисный вектор. Для ненулевого х найдем такой оператор Р, что:

$$P \cdot x = \alpha e_1$$

Решение:

$$P = I - \frac{2}{v^T \cdot v} v \cdot v^T$$

$$v = x \pm |x| e_1$$

Для вычислительной устойчивости берут знак, совпадающий с x_1 (первая координата) - чтобы в случае коллинеарности не занулить v

Пусть матрица A состоит из столбцов $\{a_1, a_2, ..., a_n\}$. Найдем оператор P_{a1} . Он действует на матрицу A следующим образом:

$$P_{a_1} \cdot A = \begin{pmatrix} r_{11} & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

Теперь рассмотрим оператор P_{a2} . Первую координату векторов он не изменяет, а на остальные действует подобно предыдущему оператору.

$$P_{a_2} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P_{n-1} \end{bmatrix}$$

 P_{n-1} действует в (n-1)-мерном пространстве таким образом, что отрезок столбца \mathbf{a}_2 в (n-1)-мерном пространстве (без первой координаты) преобразуется в вектор, коллинеарный \mathbf{e}_2 . $(\mathbf{e}_2 = (1, 0, ..., 0)$ в (n-1)-мерном пространстве)

Таким образом:

$$P_{a_2} \cdot P_{a_1} \cdot A = \begin{pmatrix} r_{11} & \dots & \dots \\ 0 & r_{22} & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots \end{pmatrix}$$

После *n-1* таких операций, получаем:

$$P_{a_{n-1}} \cdot \ldots \cdot P_{a_1} \cdot A = \begin{pmatrix} r_{11} & \ldots & \ldots \\ 0 & r_{22} & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & r_{nn} \end{pmatrix} = R$$

Операторы Р сами себе обратны. Это значит, что:

$$A = P_{a_1} \cdot \ldots \cdot P_{a_{n-1}} \cdot R = Q \cdot R$$

Замечания:

- При реализации алгоритма нужно хранить не матрицы P, а соответствующие векторы v искомую матрицу Q можно найти по ним
- 2) При восстановлении нужно не перемножать матрицы Р вслепую, а использовать их специфику.

Алгоритм Хаусхолдера. Обсуждение

Сложность алгоритма:
$$4/3 N^3 + O(N^2)$$

Использование: Для решения СЛАУ - НИКОГДА!

МНК для переопределенных систем. Построение ортогональных матриц

Точность: Лучше, чем в оригинальном QR разложении (меньшее количество арифметических операций)

Алгоритм Гивенса (QR разложение)

Сложность алгоритма:
$$2N^3 + O(N^2)$$

Использование: Для решения СЛАУ - НИКОГДА!

МНК для переопределенных систем. Построение ортогональных матриц

Точность: Лучше, чем в оригинальном QR разложении (меньшее количество арифметических операций)

Замечание: Применяется в солвере GMRES как вспомогательный алгоритм. Будет рассмотрен далее

Рассмотрим СЛАУ со специфической (трехдиагональной) матрицей:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ a_2 & b_2 & c_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & a_3 & b_3 & c_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & a_n & b_n \end{pmatrix}$$

Рассмотрим СЛАУ со специфической (трехдиагональной) матрицей:

$$\begin{cases} b_1 x_1 + c_1 x_2 = d_1 \\ a_2 x_1 + b_2 x_2 + c_2 x_3 = d_2 \\ \cdots \\ a_{n-1} x_{n-2} + b_{n-1} x_{n-1} + c_{n-1} x_n = d_{n-1} \\ a_n x_{n-1} + b_n x_n = d_n \end{cases}$$

 x_{i} переменную можно вычислить через x_{i+1} , i = 1, ..., n-1

$$x_{i} = \gamma_{i} x_{i+1} + \beta_{i}$$

$$\gamma_{1} = \frac{-c_{1}}{b_{1}}; \beta_{1} = \frac{d_{1}}{b_{1}}$$

$$\gamma_{i} = \frac{-c_{i}}{a_{i}\gamma_{i-1} + b_{i}}; \beta_{i} = \frac{\frac{d_{i} - a_{i}\beta_{i-1}}{a_{i}\gamma_{i-1} + b_{i}}}$$

Для последней переменной:

$$a_n \cdot \left(\gamma_{n-1} x_n + \beta_{n-1} \right) + b_n \cdot x_n = d_n$$

Вычисляем x_n . Далее находим переменные в обратном порядке через рекурсивные соотношения

Достаточное условие устойчивости - диагональное преобладание

$$|b_{i}| \ge |a_{i}| + |c_{i}|, i = 1, ..., n$$

для одной строки - неравенство обязано быть строгим!

Метод трехдиагональной прогонки. Обсуждение

Сложность алгоритма: O(N)

Использование: Трехдиагональные СЛАУ - ВСЕГДА !!!

Точность: Превосходно

Замечания:

- 1) Если матрица близка к трехдиагональной, можно провести элементарные преобразования
- 2) Аналогичные алгоритмы есть для 5 -, 7 -, ... диагональной прогонки