

Методы вычислений

Численные методы решения СЛАУ



Андрей Леонидович Масленников amas@bmstu.ru

Системы линейных алгебраических уравнений

Система линейных алгебраических уравнений:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \iff \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1m}x_m = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2m}x_m = b_2 \\ & \vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \cdots + a_{nm}x_m = b_n \end{cases}$$

где:

n — количество уравнений

m — количество неизвестных

 x_i — неизвестные

 a_{ij} — коэффициенты

 b_i — свободные члены

A — матрица $n \times m$

 \mathbf{x} — вектор $m \times 1$

 \mathbf{b} — вектор $n \times 1$

Решение СЛАУ имеет вид:

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$

Свойства СЛАУ:

- $b_i = 0$ однородная система;
- m = n совместная система (единственное решение)
- n > m переопределенная система (множество решений)
- n < m недоопределённая система (нет решений)

Теорема Кронекера—Капелли.

Система уравнений $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ разрешима (имеет хотя бы одно решение) тогда и только тогда, когда $\mathrm{rang}(\mathbf{A}) = \mathrm{rang}(\mathbf{A}, \mathbf{b})$ где (\mathbf{A}, \mathbf{b}) — расширенная матрица системы. В этом случае количество искомых переменных равно порядку матрицы, а решение системы будет единственным.

Методы решения

Прямые методы решения СЛАУ — это методы в которых вычисление решения осуществляется за конечное количество операций

- метод решения через обратную матрицу;
- метод Крамера;
- метод Гаусса;
- метод Гаусса-Жордана;
- метод через разложение Холецкого;
- метод через LU-разложение;
- и др.

Решение будет найдено всегда, если метод применим, но возможны очень большие ошибки

Итерационные методы решения СЛАУ — это методы в которых вычисление решения осуществляется в результате последовательного приближения (итерационного процесса)

- метод Якоби (метод простой итерации)
- метод Гаусса-Зейделя;
- метод релаксации;
- метод сопряженных градиентов;
- метод бисопряженных градиентов;
- метод стабилизированных биспопряженных градиентов;
- идр.

Решение не всегда может быть найдено

Метод решения через обратную матрицу

Алгоритм метода

1. Вычисляем все алгебраические дополнения

$$A_{ij} = (-1)^{i+j} M_{ij}$$

2. Вычисляем обратную матрицу

$$\mathbf{A}^{-1} = \frac{1}{\det \mathbf{A}} \operatorname{adj} \mathbf{C}$$

3. Вычисляем решение

$$\mathbf{x} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{b}$$

Условия применимости

• $det(\mathbf{A}) \neq 0$.

Метод требует существенных вычислительных ресурсов, если не использовать разложение исходной матрицы ${f A}$

Метод Крамера

Вычисляем поэлементно решение

$$x_{i} = \frac{1}{\det(\mathbf{A})} \begin{vmatrix} a_{1,1} & \dots & b_{1} & a_{1,i+1} \dots & a_{1,n} \\ & & \vdots & & \\ a_{n,1} & \dots & b_{n} & a_{n,i+1} \dots & a_{n,n} \end{vmatrix}$$

Условия применимости

- A квадратная матрица;
- $det(\mathbf{A}) \neq 0$.

Метод требует существенных вычислительных ресурсов

Метод Гаусса

Алгоритм метода

for
$$i = 1$$
: n
for $j = i+1$: n
 $k = a_{ji} / a_{ii}$
 $\mathbf{a}_j = \mathbf{a}_j - k\mathbf{a}_i$
 $b_j = b_j - kb_i$

end

end

for i = n : 1

$$x_{i} = \frac{b_{i} - \sum_{k=i+1}^{n} a_{ik} x_{k}}{a_{ii}}$$

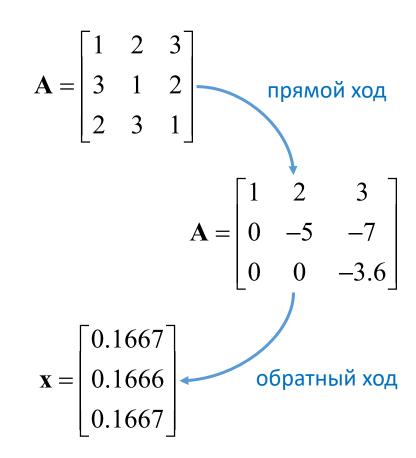
end

Условия применимости

• А — квадратная матрица

прямой ход

обратный ход



Устойчивость метода сильно зависит от диагональных элементов матрицы **A**

Метод Гаусса. Пример

Пусть даны

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \cdot \frac{3}{1} = \begin{bmatrix} 0 & -5 & -7 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \cdot \frac{2}{1} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -5 \end{bmatrix}$$
$$\begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \cdot \frac{3}{1} = \begin{bmatrix} -2 \end{bmatrix} \qquad \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \end{bmatrix} \cdot \frac{2}{1} = \begin{bmatrix} -2 \end{bmatrix}$$

Итерация 1
$$i=1, \qquad k=i+1=2:$$
 Итерация 2 $i=1, \qquad k=i+1=3:$

$$= i + 1 = 2$$
:

$$i=1$$
,

$$k = i + 1 = 3$$

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \cdot \frac{3}{1} = \begin{bmatrix} 0 & -5 & -7 \end{bmatrix}$$

$$2 \quad 3 \cdot \frac{1}{1} = \begin{bmatrix} 0 & -5 & -7 \end{bmatrix}$$

$$[1] - [1] \cdot \frac{2}{1} = [-2]$$

$$\mathbf{A} = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -5 & -7 \\ 2 & 3 & 1 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{b} = \begin{vmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -5 & -7 \\ 2 & 3 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ 1 \end{bmatrix} \qquad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -5 & -7 \\ 0 & -1 & -5 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ -1 \end{bmatrix}$$

Итерация 3
$$i=2, k=i+1=3$$
:

$$\begin{bmatrix} 0 & -1 & -5 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -5 & -7 \end{bmatrix} \cdot \frac{-1}{-5} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & -3.6 \end{bmatrix}$$

$$[(-1)]-[(-2)]\cdot\frac{-1}{-5}=[-0.6]$$

$$x_3 = -0.6 / (-3.6) = 0.1667$$

$$x_2 = \frac{-2 - (-7 \cdot 01667)}{-5} = 0.1666$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.1667 \\ 0.1666 \\ 0.1667 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 0 & -5 & -7 \\ 0 & 0 & -3.6 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \\ -0.6 \end{bmatrix}$$

$$x_1 = \frac{1 - (2 \cdot 01666 + 3 \cdot 0.1667)}{1} = 0.1667$$

Метод Гаусса—Жордана

Алгоритм метода

for
$$i = 1 : n$$

for $j = i+1 : n$
 $k = a_{ji} / a_{ii}$
 $\mathbf{a}_{j} = \mathbf{a}_{j} - k\mathbf{a}_{i}$
 $b_{j} = b_{j} - kb_{i}$

end

end

for
$$i = n : 1$$

for
$$j = i - 1:1$$

$$k = a_{ji} / a_{ii}$$

$$\mathbf{a}_{j} = \mathbf{a}_{j} - k\mathbf{a}_{i}$$

$$b_{j} = b_{j} - kb_{i}$$

end

end

Условия применимости

• А — квадратная матрица

прямой ход

обратный ход

$$\mathbf{C} = (\mathbf{A}, \mathbf{b}) = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 3 & 1 & 2 & 1 \\ 2 & 3 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$
 прямой ход

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & -3.6 & -0.6 \end{bmatrix}$$
 обратный ход

вычисление решения
$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0.1680 \\ 0.1660 \\ 0.1667 \end{bmatrix}$$

Метод Гаусса—Жордана. Пример

После завершения прямого хода:

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & -5 & -7 & -2 \\ 0 & 0 & -3.6 & -0.6 \end{bmatrix}$$

Решение

$$x_1 = 0.168 / 1 = 0.1680$$

 $x_2 = (-0.8333) / (-5) = 0.1660$
 $x_3 = (-0.6) / (-3.6) = 0.1667$

$$i = 3, k = i - 1 = 2;$$

$$[0 -5 -7 -2] - [0 0 -3.6 -0.6] \cdot \frac{-7}{-3.6} = [0 -5 0 -0.8333]$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 1 \\ 0 & -5 & 0 & -0.8333 \\ 0 & 0 & -3.6 & -0.6 \end{bmatrix}$$

$$i = 3, k = i - 1 = 1;$$

$$[1 2 3 1] - [0 0 -3.6 -0.6] \cdot \frac{3}{-3.6} = [1 2 0 0.5]$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & 0.5 \\ 0 & -5 & 0 & -0.8333 \\ 0 & 0 & -3.6 & -0.6 \end{bmatrix}$$

$$i = 2, k = i - 1 = 1;$$

$$[1 2 0 0.5] - [0 -5 0 -0.833] \cdot \frac{2}{-5} = [1 0 0 0.168]$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0.168 \\ 0 & -5 & 0 & -0.8333 \end{bmatrix}$$

Метод разложения Холецкого

Алгоритм метода

- 1. Находим разложение Холецкого
- 2. Решаем систему $\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}$
- 3. Решаем систему $\mathbf{L}^{\mathbf{T}}\mathbf{x} = \mathbf{y}$

Условия применимости

• А — положительно определенная матрица

Находим разложение Холецкого

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1.4 & 1 & 1 \\ 1 & 0.9 & 1 \\ 1 & 1 & 1.4 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} \implies \mathbf{L} = \begin{bmatrix} 1.18 & 0 & 0 \\ 0.85 & 0.43 & 0 \\ 0.85 & 0.66 & 0.5 \end{bmatrix}$$

Несимметричность матрицы **A** не накладывает ограничений на применимость, но полученное решение будет не соответствовать истинному.

Решаем Ly = b

$$y_1 = 1/1.18 = 0.85$$

$$y_2 = \frac{1 - (0.85 \cdot 0.85)}{0.43} = 0.65$$

$$y_3 = \frac{1 - (0.85 \cdot 0.85 + 0.65 \cdot 0.66)}{0.5} = -0.31$$

Решаем
$$\mathbf{L}^{\mathbf{T}}\mathbf{x} = \mathbf{y}$$

$$x_3 = -0.31/0.5 = -0.62$$

$$x_2 = \frac{0.65 - 0.66 \cdot (-0.62)}{0.43} = 2.48$$

$$x_1 = \frac{0.85 - (0.85 \cdot (-0.62) + 0.85 \cdot 2.48)}{1.18} = -0.62$$

Итерационные методы

Итерационные методы решения СЛАУ — это методы в которых вычисление решения осуществляется в результате последовательного приближения (итерационного процесса)

- метод Якоби
 (метод простой итерации)
- метод Гаусса-Зейделя;
- метод релаксации;
- метод сопряженных градиентов;
- метод бисопряженных градиентов;
- метод стабилизированных биспопряженных градиентов;
- и др.

Решение не всегда может быть найдено

Алгоритм итерационных методов

while criteia ok for i = i : n $x_i = \dots$ end k = k + 1end

Критерии остановки:

• по максимальному количеству итераций

$$k \ge k_{\text{max}}$$

• по величине относительной ошибки решения

$$\|\mathbf{x}_{k} - \mathbf{x}_{k-1}\| \le \varepsilon$$

• по величине абсолютной ошибки решения

$$\|\mathbf{A}\mathbf{x}_k - \mathbf{b}\| \le \varepsilon$$

Итерационные методы решения СЛАУ

Метод Якоби

Решение рассчитывается итерационно

• в векторно-матричном виде

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}_k + \mathbf{g}$$

• в поэлементном виде

$$x_{i,k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j \neq i} a_{ij} x_{j,k} \right)$$

где

 ${f L}$, ${f U}$ — нижняя и верхняя треугольные части ${f A}$

$$\mathbf{D} = \operatorname{diag}(\mathbf{A})$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1} \mathbf{A} = \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D} - \mathbf{A})$$

$$B = -D^{-1}(L + U) = -D^{-1}(A - D)$$

$$\mathbf{g} = \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$$

Критерий сходимости

$$\left|\lambda_i(\mathbf{B})\right| < 1, \quad \forall i = 1...n$$

При сходимости справедливо:

- $\|\mathbf{B}\|$ < 0 при $\forall \mathbf{x}_0$
- $q = \|\mathbf{B}\|$ (q скорость сходимости, т.е. решение будет сходиться к истинному со скоростью геометрической прогрессии)
- $\|\mathbf{x}_k \mathbf{x}\| < q^k \|\mathbf{x}_0 \mathbf{x}\|$

Метод требует задания начальных условия, т.е. вектора $\mathbf{x_0}$, выбор которого влияет на сходимость к истинному решению

Итерационные методы решения СЛАУ

Метод Гаусса—Зейделя

Решение рассчитывается итерационно

• в векторно-матричном виде

$$(\mathbf{L} + \mathbf{D})\mathbf{x}_{k+1} = -\mathbf{U}\mathbf{x}_k + \mathbf{B}$$

• в поэлементном виде

$$x_{i,k+1} = \sum_{j=1}^{i-1} c_{ij} x_{j,k+1} + \sum_{j=i+1}^{n} c_{ij} x_{j,k} + d_i$$

где

L, U — нижняя и верхняя треугольные части A

 $\mathbf{D} = \operatorname{diag}(\mathbf{A})$

$$c_{ij} = \begin{cases} -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}, j \neq i \\ 0, \quad j = i \end{cases}$$

$$d_i = \frac{b_i}{a_{ii}}$$

Критерий сходимости

$$\left\| -(\mathbf{L} + \mathbf{D})^{-1} \mathbf{U} \right\| < 1$$

Как правило сходится для:

- симметричных и положительно определённых матриц;
- матриц с доминирующими диагональным элементами.

Может сходиться и при невыполнении этих условий

Схема вычислений

$$\begin{bmatrix} x_{1,k} \\ x_{2,k} \\ x_{3,k} \end{bmatrix} \xrightarrow{i=1} \begin{bmatrix} x_{1,k+1} \\ x_{2,k} \\ x_{3,k} \end{bmatrix} \xrightarrow{i=2} \begin{bmatrix} x_{1,k+1} \\ x_{2,k+1} \\ x_{3,k} \end{bmatrix} \xrightarrow{i=3} \begin{bmatrix} x_{1,k+1} \\ x_{2,k+1} \\ x_{3,k+1} \end{bmatrix} \xrightarrow{k=k+1} \begin{bmatrix} x_{1,k} \\ x_{2,k} \\ x_{3,k} \end{bmatrix}$$

Итерационные методы решения СЛАУ

Метод релаксации

Решение рассчитывается итерационно

• в векторно-матричном виде

$$(\omega \mathbf{L} + \mathbf{D}) \mathbf{x}_{k+1} = -(\omega \mathbf{U} + (\omega - 1) \mathbf{D}) \mathbf{x}_k + \omega \mathbf{B}$$

• в поэлементном виде

$$x_{i,k+1} = (1 - \omega)x_{i,k} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j < i} a_{ij} x_{j,k+1} - \sum_{j > i} a_{ij} x_{j,k} \right)$$

За счет коэффициента релаксации ω имеется возможность обеспечить более быструю сходимость

Выбор коэффициента релаксации

$$\omega = 1 + \left(\frac{\rho(\mathbf{T})}{1 + \sqrt{1 - \rho(\mathbf{T})^2}}\right)^2$$

$$\mathbf{T} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A}$$

$$\rho(\mathbf{T}) = \max |\lambda_i(\mathbf{T})|$$

где $ho(\cdot)$ — спектральный радиус матрицы

данный подход сформирован для трехдиагональных матрицы, а в общем случае выбор коэффициента релаксации — не тривиален

Для симметричных, положительно полуопределенных матриц метод гарантированно сходится при $0<\omega<2$

Методы Крыловского типа

Методы Крыловского типа — это методы в которых, фактически, решается следующая оптимизационная задача

$$(\mathbf{A}\mathbf{x},\mathbf{x}) - 2(\mathbf{b},\mathbf{x}) \rightarrow \min$$

Метод сопряженных градиентов

А – действительная,симметричная и положительно определённая матрица **Метод бисопряженных** градиентов

А – действительная и положительно определённая матрица

Стабилизированный метод бисопряженных градиентов

А – действительная и положительно определённая матрица

Дополнительное условие выхода

$$\frac{\left\|\mathbf{r}_{k}\right\|}{\left\|\mathbf{b}\right\|} \leq \varepsilon$$

Методы Крыловского типа

Метод сопряженных градиентов

Инициализация:

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$$

$$\mathbf{z}_0 = \mathbf{r}_0$$

k-ая итерация:

$$\alpha_k = \frac{\left(\mathbf{r}_{k-1}, \mathbf{r}_{k-1}\right)}{\left(\mathbf{A}\mathbf{z}_{k-1}, \mathbf{z}_{k-1}\right)}$$

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{z}_{k-1}$$

$$\mathbf{r}_{k} = \mathbf{r}_{k-1} - \alpha_{k} \mathbf{A} \mathbf{z}_{k-1}$$

$$\beta_k = \frac{\left(\mathbf{r}_k, \mathbf{r}_k\right)}{\left(\mathbf{r}_{k-1}, \mathbf{r}_{k-1}\right)}$$

$$\mathbf{z}_{k} = \mathbf{r}_{k} + \beta_{k} \mathbf{z}_{k-1}$$

Метод бисопряженных градиентов

Инициализация:

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0 \qquad \mathbf{z}_0 = \mathbf{r}_0$$

$$\mathbf{z}_0 = \mathbf{r}_0$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0$$

$$\mathbf{p}_0 = \mathbf{r}_0 \qquad \qquad \mathbf{s}_0 = \mathbf{r}_0$$

k-ая итерация:

$$\alpha_k = \frac{\left(\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{r}_{k-1}\right)}{\left(\mathbf{s}_{k-1}, \mathbf{A}\mathbf{z}_{k-1}\right)}$$

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_k \mathbf{z}_{k-1}$$

$$\mathbf{r}_{k} = \mathbf{r}_{k-1} - \alpha_{k} \mathbf{A} \mathbf{z}_{k-1}$$

$$\mathbf{p}_k = \mathbf{p}_{k-1} - \alpha_k \mathbf{A}^T \mathbf{s}_{k-1}$$

$$\beta_k = \frac{\left(\mathbf{p}_k, \mathbf{r}_k\right)}{\left(\mathbf{p}_{k-1}, \mathbf{r}_{k-1}\right)}$$

$$\mathbf{z}_{k} = \mathbf{r}_{k} + \beta_{k} \mathbf{z}_{k-1}$$

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{p}_k + \beta_k \mathbf{s}_{k-1}$$

Стабилизированный метод бисопряженных градиентов

Инициализация:

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0$$

$$\rho_0 = \alpha_0 = \omega_0 = 1$$

$$\tilde{\mathbf{r}}_0 = \mathbf{r}_0$$

$$\boldsymbol{\nu}_0 = \mathbf{p}_0 = 0$$

$$k$$
-ая итерация:

$$\rho_k = (\tilde{\mathbf{r}}, \mathbf{r}_{k-1})$$

$$\beta_k = \frac{\rho_k}{\rho_{k-1}} \frac{\alpha_{k-1}}{\omega_{k-1}}$$

$$\mathbf{p}_{k} = \mathbf{r}_{k-1} + \beta_{k} (\mathbf{p}_{k-1} - \omega_{k-1} \upsilon_{k-1})$$

$$\upsilon_k = \mathbf{A}\mathbf{p}_k$$

$$\alpha_k = \frac{\rho_k}{(\tilde{\mathbf{r}}, \nu_k)}$$

$$\left(\mathbf{q},\mathbf{d}\right) = \sum_{i=1}^{n} q_i^* d_i$$

$$\left[\mathbf{q},\mathbf{d}\right] = \sum_{i=1}^{n} q_i d_i$$

$$\mathbf{s}_k = \mathbf{r}_{k-1} - \alpha_k \mathbf{v}_k$$

$$\mathbf{t}_k = \mathbf{A}\mathbf{s}_k$$

$$\omega_k = \frac{\left[\mathbf{t}_k, \mathbf{s}_k\right]}{\left[\mathbf{t}_k, \mathbf{t}_k\right]}$$

$$\mathbf{x}_{k} = \mathbf{x}_{k-1} + \alpha_{k} \mathbf{p}_{k} + \omega_{k} \mathbf{s}_{k}$$

$$\mathbf{r}_{k} = \mathbf{s}_{k} - \omega_{k} \mathbf{t}_{k}$$