

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СИСТЕМ УРАВНЕНИЙ

Методические указания
к выполнению лабораторных работ по курсу
«Численные методы»
для студентов III курса ФПМИ

УДК 519.61(076.5)
Ч-671

Составители: ассист. *М.Г. Персова*,
канд. техн. наук, доц. *М.Э. Рояк*,
д-р техн. наук, проф. *Ю.Г. Соловейчик*,
канд. техн. наук, ассист. *А.В. Чернышев*

Рецензент: канд. физ.-мат. наук, доц. *Т.В. Войтович*

Работа подготовлена на кафедре прикладной математики

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 1

ПРЯМЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ

Цель работы

Разработать программу решения СЛАУ прямым методом с хранением матрицы в профильном или ленточном формате. Исследовать накопление погрешности и ее зависимость от числа обусловленности. Сравнить реализованный метод по точности получаемого решения и количеству действий с методом Гаусса.

Теоретическая часть

Пусть дана система линейных алгебраических уравнений:

$$Ax = F. \quad (1.1)$$

Рассматриваемые в данной лабораторной работе прямые методы основаны на разложении исходной матрицы на произведение нескольких матриц специального вида. Существует несколько типов разложений:

- LU – разложение: L – нижнетреугольная матрица, U – верхнетреугольная матрица с единицами на главной диагонали;
- $LU^{(*)}$ – разложение: L – нижнетреугольная матрица с единицами на главной на диагонали, U – верхнетреугольная матрица;
- LL^T – разложение (метод квадратного корня): L – нижнетреугольная матрица;
- LDL^T – разложение (метод квадратного корня для неположительно-определённых матриц): L – нижнетреугольная матрица, D – диагональная матрица, причем $d_{ii} = \pm 1$;
- LDL^T – разложение: L – нижнетреугольная матрица с 1 на диагонали, D – диагональная матрица;

- LDU – разложение: L – нижнетреугольная матрица с 1 на диагонали, D – диагональная матрица, U – верхнетреугольная матрица с 1 на диагонали;

- $LU(sq)$ – разложение: L – нижнетреугольная матрица, U – верхнетреугольная матрица и $l_{ii} = u_{ii} \quad \forall i$.

Выбор того или иного метода зависит от свойств матрицы A (симметричность, положительная определенность, положение ненулевых элементов).

В качестве примера рассмотрим решение системы методом, основанным на LU -разложении. Предположим, что нам удалось разложить матрицу:

$$A = LU . \quad (1.2)$$

Подставляя (1.2) в (1.1), получаем:

$$LUx = F . \quad (1.3)$$

Обозначим:

$$Ux = y , \quad (1.4)$$

тогда подставляя (1.4) в (1.3), получим:

$$Ly = F . \quad (1.5)$$

Таким образом, решение системы (1.1) сводится к трем основным этапам:

- 1) из элементов матрицы A найти элементы матриц L и U ;
- 2) решить систему (1.5) с нижнетреугольной матрицей L (прямой ход);
- 3) решить систему (1.4) с верхнетреугольной матрицей U (обратный ход).

Рассмотрим алгоритм получения LU – разложения. Матрицы L и U будем искать в следующем виде:

$$L = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & 0 & \dots \\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} 1 & u_{12} & u_{13} & \dots \\ 0 & 1 & u_{23} & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}. \quad (1.6)$$

Учитывая равенство (1.2) и умножая последовательно строки матрицы L на столбцы матрицы U , получаем систему, состоя-

щую из n^2 уравнений с n^2 неизвестными l_{ij} , $i = \overline{1, n}$, $j = \overline{1, i}$ и u_{ij} , $i = \overline{1, n}$, $j = \overline{i+1, n}$ (n – размерность СЛАУ):

$$\begin{aligned} a_{11} &= l_{11}; \\ a_{21} &= l_{21}; \quad a_{22} = l_{22}; \quad a_{12} = l_{11} \cdot u_{12}; \quad a_{31} = l_{31}; \quad a_{32} = l_{31} \cdot u_{12} + l_{32}; \\ a_{33} &= l_{31} \cdot u_{13} + l_{32} \cdot u_{23} + l_{33}; \\ a_{13} &= l_{11} \cdot u_{13}; \quad a_{23} = l_{21} \cdot u_{13} + l_{22} \cdot u_{23}; \\ &\dots \end{aligned} \quad (1.7)$$

Решая систему (1.7), можно получить общие формулы для нахождения элементов матриц L и U :

$$l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, \quad u_{ij} = \frac{1}{l_{ii}} \left[a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \right]. \quad (1.8)$$

Применяя аналогичный подход, можно получить формулы для элементов матриц разложения в других методах.

Практическая часть

1. Получить формулы разложения матрицы A в соответствии с вариантом задания.

2. Реализовать указанный в варианте задания прямой метод с учетом следующих требований:

- размерность матрицы, элементы матрицы и вектор правой части читать из файлов, результаты записывать в файл;
- исходную матрицу в файле задавать в профильном или ленточном формате в соответствии с вариантом задания;
- в головной программе резервировать объем памяти, необходимый для хранения в нем только одной матрицы и необходимого числа векторов (т.е. треугольные и диагональная матрицы, полученные в результате разложения, должны храниться на месте исходной матрицы);
- элементы матрицы обрабатывать в порядке, соответствующем формату хранения, т.е. необходимо работать именно со столбцами верхнего и строками нижнего треугольников;

- при программировании предусмотреть возможность простой смены точности представления чисел (одинарной и двойной).

3. Протестировать разработанную программу.

4. Провести исследование реализованного метода на матрицах, число обусловленности которых регулируется за счёт изменения диагонального преобладания (т.е. оценить влияние увеличения числа обусловленности на точность решения).

Для этого необходимо решить последовательность СЛАУ:

$$A^k x^k = F^k, k = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.9)$$

где матрицы A^k строятся следующим образом:

$$a_{ij} = \begin{cases} -\sum_{i \neq j} a_{ij}, & i > 1 \\ -\sum_{i \neq j} a_{ij} + 10^{-k}, & i = 1 \end{cases}$$

и $a_{ij} \in \{0, -1, -2, -3, -4\}$ выбираются достаточно произвольно, а правая часть F_k получается умножением матрицы A^k на вектор $x^* = (1, \dots, n)$.

Для каждого k , для которого система (1.9) вычислительно разрешима, оценить погрешность найденного решения. Сравнить результаты при реализации метода с одинарной и двойной точностью, а также при вычислении с двойной точностью только скалярных произведений. Исследования представить в виде следующей таблицы:

k	x^k (одинарная точность)	$x^* - x^k$ (одинарная точность)	x^k (двойная точность)	$x^* - x^k$ (двойная точность)	x^k (скаляр. произв.)	$x^* - x^k$ (скаляр. произв.)

Для одного из значений k попытаемся найти операцию, вызывающую скачкообразное накопление погрешности, пояснить полученные результаты.

5. Провести аналогичные исследования на матрицах Гильберта различной размерности.

Матрица Гильберта размерности k строится следующим образом:

$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, \quad i, j = \overline{1, k}. \quad (1.10)$$

6. Выполнить расчет количества действий для реализованного метода и сравнить с другим методом по заданию преподавателя.

7. Реализовать метод Гаусса, желательно с выбором ведущего элемента, для плотных матриц. Сравнить метод Гаусса по точности получаемого решения и по количеству действий с реализованным прямым методом согласно варианту задания.

Варианты заданий

1. LU – разложение, матрица в ленточном формате.
2. LL^T – разложение, матрица в ленточном формате.
3. LDL^T – разложение ($d_{ii} = \pm 1$), матрица в ленточном формате.
4. LDU – разложение, матрица в ленточном формате.
5. LDL^T – разложение, матрица в ленточном формате.
6. $LU^{(*)}$ – разложение, матрица в ленточном формате.
7. LU – разложение, матрица в профильном формате.
8. LL^T – разложение, матрица в профильном формате.
9. LDL^T – разложение ($d_{ii} = \pm 1$), матрица в профильном формате.
10. LDU – разложение, матрица в профильном формате.
11. LDL^T – разложение, матрица в профильном формате.
12. $LU^{(*)}$ – разложение, матрица в профильном формате.
13. LU – разложение, матрица в профильном формате; доказать эквивалентность формул LU -разложения алгоритму приведения матрицы к верхнетреугольному виду в методе Гаусса.

14. $LU^{(*)}$ – разложение, матрица в профильном формате; доказать эквивалентность формул $LU^{(*)}$ -разложения модифицированному алгоритму приведения матрицы к верхнетреугольному виду в методе Гаусса.

15. $LU(sq)$ – разложение, матрица в профильном формате.

Контрольные вопросы и задания

1. Варианты LU -разложения. Получение формул. Подсчет количества действий.

2. Погрешность, невязка, число обусловленности и их связь.

3. Дана матрица $A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 101 & -10 & -10 \\ 0 & -10 & 2 & 1 \\ 0 & -10 & 1 & 101 \end{bmatrix}$ и вектор

$f = (1, 0, 1, 0)^T$. Решить СЛАУ $Ax = f$ методом квадратного корня.

4. Указать элементы матрицы L , которые могут быть ненулевыми при построении LU -разложения матрицы

$$A = \begin{bmatrix} 12 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 14 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 7 & 3 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 3 & 8 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 9 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -2 & 0 & 1 & 12 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 12 \end{bmatrix}$$

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 2

ИТЕРАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ СЛАУ

Цель работы

Разработать программы решения СЛАУ методами Якоби, Гаусса-Зейделя, блочной релаксации с хранением матрицы в диагональном формате. Исследовать сходимость методов для различных тестовых матриц и её зависимость от параметра релаксации. Изучить возможность оценки порядка числа обусловленности матрицы путем вычислительного эксперимента.

Теоретическая часть

Пусть дана система линейных алгебраических уравнений:

$$Ax = F. \quad (2.1)$$

Выбирается начальное приближение $x^{(0)} = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$ (при отсутствии априорных данных для выбора приближения в качестве начального приближения можно выбрать нулевой вектор).

Метод Якоби. Каждое следующее приближение в методе Якоби рассчитывается по формуле:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, \dots, n, \quad (2.2)$$

где k – номер текущей итерации.

Метод Гаусса-Зейделя. Каждое последующее приближение рассчитывается по формуле:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right], \quad i = 1, \dots, n. \quad (2.3)$$

Для ускорения сходимости итерационного процесса можно использовать *параметр релаксации*.

Итерационный процесс в *методе Якоби с параметром релаксации* выглядит следующим образом:

$$\hat{x}_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{1}{a_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right], \quad (2.4)$$

$$x_i^{(k+1)} = \omega \hat{x}_i^{(k+1)} + (1 - \omega) x_i^k, \quad 0 < \omega \leq 1. \quad (2.5)$$

Подставляя (2.4) и (2.5) в (2.2), получаем:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right], \quad 0 < \omega \leq 1. \quad (2.6)$$

В методе *Гаусса-Зейделя с параметром релаксации* (другое название – *метод релаксации*) итерационный процесс описывается следующим образом:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \frac{\omega}{a_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right], \quad 0 < \omega < 2. \quad (2.7)$$

Условия выхода из итерационного процесса для рассмотренных методов:

- выход по относительной невязке:

$$\frac{\|F - Ax^{(k)}\|}{\|F\|} < \varepsilon; \quad (2.8)$$

- защита от закликивания: $k > \maxiter$, \maxiter – максимальное количество итераций.

Метод блочной релаксации

Исходная матрица A разбивается на блоки (в рамках лабораторной работы будем рассматривать случай, когда A разбивается на квадратные блоки *равной* размерности). Вектор правой части и вектор неизвестных разбиваются на блок-векторы соответствующей размерности. Например, для размера блока, равного двум, получаем:

$$\left[\begin{array}{cc|cc} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots \\ \hline a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right] \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \dots \end{bmatrix}, \quad (2.9)$$

где

$$\begin{aligned} A_{11} &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad A_{12} = \begin{bmatrix} a_{13} & a_{14} \\ a_{23} & a_{24} \end{bmatrix}, \quad \dots \\ X_1 &= \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}, \quad X_2 = \begin{bmatrix} x_3 \\ x_4 \end{bmatrix}, \quad \dots \\ F_1 &= \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \end{bmatrix}, \quad F_2 = \begin{bmatrix} f_3 \\ f_4 \end{bmatrix}, \quad \dots \end{aligned} \quad (2.10)$$

Запишем формулу (2.7) для блоков матрицы A и блок-векторов X и F :

$$X_i^{(k+1)} = X_i^{(k)} + \omega A_{ii}^{-1} \left[F_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} X_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n A_{ij} X_j^{(k)} \right], \quad 0 < \omega < 2. \quad (2.11)$$

Обозначим

$$R_i^{(k)} = \left[F_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} X_j^{(k+1)} - \sum_{j=i}^n A_{ij} X_j^{(k)} \right], \quad (2.12)$$

$$Y_i^{(k)} = X_i^{(k+1)} - X_i^{(k)}. \quad (2.13)$$

Тогда, подставляя (2.12) и (2.13) в (2.11) и умножая слева на A_{ii} , для каждого блок-вектора $Y_i^{(k)}$ получаем СЛАУ:

$$A_{ii}Y_i^{(k)} = \omega R_i^{(k)}. \quad (2.14)$$

Решение полученных систем (2.14) рекомендуется выполнять с использованием факторизации матрицы A_{ii} , причём факторизацию следует выполнять 1 раз перед первой итерацией.

Практическая часть

1. Реализовать метод Якоби с параметром релаксации, метод Гаусса-Зейделя с параметром релаксации и метод блочной релаксации для указанной в варианте задания матрицы в диагональном формате с учетом следующих требований:

- размерность матрицы и её параметры, точность решения СЛАУ, максимальное количество итераций, элементы матрицы, вектор правой части и начальное приближение читать из файлов;
- элементы матрицы должны храниться в диагональном формате соответственно варианту;
- матрица должна обрабатываться в соответствии с форматом;
- в реализации методов Якоби и Зейделя для итерационного шага использовать одну и ту же подпрограмму;
- в реализации блочной релаксации факторизацию матрицы выполнять на месте исходной матрицы;
- выход из итерационного процесса выполнять, если относительная невязка стала меньше заданного параметра;
- предусмотреть аварийный выход из итерационного процесса при достижении максимального количества итераций;
- результат записывать в файл в формате, соответствующем хранению начального приближения.
- в процессе счета выдавать на экран сообщение о номере текущей итерации и относительную невязку.

2. Протестировать разработанную программу.

3. Провести исследование реализованных методов на матрице с диагональным преобладанием, построенной следующим образом:

$$a_{ii} = \begin{cases} -\sum_{i \neq j} a_{ij}, & i > 1 \\ -\sum_{i \neq j} a_{ij} + 1, & i = 1, \end{cases} \quad (2.15)$$

и $a_{ij} \in \{0, -1, -2, -3, -4\}$ выбираются достаточно произвольно, а правая часть F получается умножением матрицы A на вектор $x^* = (1, \dots, n)$.

Для каждого метода решения (Якоби, Гаусса-Зейделя, блочной релаксации) определить оптимальный вес ω (вес, при котором метод сходится за наименьшее число итераций). Оптимальный вес определять с точностью 0.01.

Для каждого метода построить таблицу:

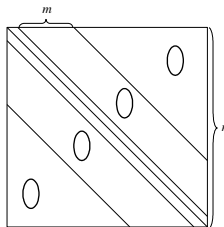
ω	x	$x^* - x$	(кол-во итераций)

Для полученного решения с помощью невязки и погрешности оценить число обусловленности $\nu_A \geq \frac{\|x - x^*\|}{\|x^*\|} / \frac{\|F - Ax\|}{\|F\|}$.

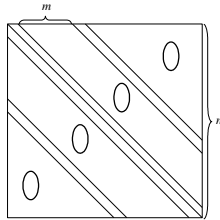
4. Провести аналогичные исследования на матрице с обратным знаком внедиагональных элементов.

Варианты заданий

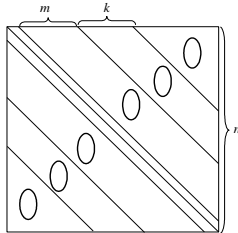
1. 5-диагональная матрица с параметрами m – количество нулевых диагоналей, n – размерность матрицы. Размер блока в реализации блочной релаксации фиксированный.



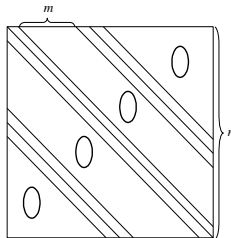
2. 7-диагональная матрица с параметрами m – количество нулевых диагоналей, n – размерность матрицы. Размер блока в реализации блочной релаксации фиксированный.



3. 7-диагональная матрица с параметрами m , k – количество нулевых диагоналей, n – размерность матрицы. Размер блока в реализации блочной релаксации фиксированный.



4. 9-диагональная матрица m – количество нулевых диагоналей, n – размерность матрицы. Размер блока в реализации блочной релаксации фиксированный.



5. Матрица из варианта 1. Размер блока в реализации блочной релаксации нефиксированный.

6. Матрица из варианта 2. Размер блока в реализации блочной релаксации нефиксированный.

7. Матрица из варианта 3. Размер блока в реализации блочной релаксации нефиксированный.

8. Матрица из варианта 4. Размер блока в реализации блочной релаксации нефиксированный.

9. Матрица из варианта 1. Размер блока в реализации блочной релаксации переменный. Исследовать зависимость скорости сходимости от размеров блока.

10. Матрица из варианта 2. Размер блока в реализации блочной релаксации переменный. Исследовать зависимость скорости сходимости от размеров блока.

11. Матрица из варианта 3. Размер блока в реализации блочной релаксации переменный. Исследовать зависимость скорости сходимости от размеров блока.

12. Матрица из варианта 4. Размер блока в реализации блочной релаксации переменный. Исследовать зависимость скорости сходимости от размеров блока.

Контрольные вопросы и задания

1. Методы Якоби и Гаусса-Зейделя. Учет параметра релаксации.

2. Условия выхода из итерационного процесса. Показать эквивалентность выхода из итерационного процесса по невязке и по шагу.

3. Вывод формул блочной релаксации.

4. Дана матрица:

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & -0.1 & 0 \\ 0 & 100 & -10 & 0 & -1 \\ 0 & -10 & 100 & 0 & 0 \\ -0.1 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 100 \end{bmatrix}.$$

Для правой части $(1, 0, 1, 0, 1)$ и нулевого начального приближения выполнить одну итерацию метода последовательной верхней релаксации с коэффициентом релаксации $\omega = 1.2$. Результат округлить до трёх значащих цифр. Оценить число обусловленности матрицы A .

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 3

РЕШЕНИЕ РАЗРЕЖЕННЫХ СЛАУ ТРЕХШАГОВЫМИ ИТЕРАЦИОННЫМИ МЕТОДАМИ С ПРЕДОБУСЛОВЛИВАНИЕМ

Цель работы

Изучить особенности реализации трехшаговых итерационных методов для СЛАУ с разреженными матрицами. Исследовать влияние предобусловливания на сходимость изучаемых методов на нескольких матрицах большой (не менее 10000) размерности.

Теоретическая часть

МЕТОД СОПРЯЖЕННЫХ ГРАДИЕНТОВ

Алгоритм классического метода сопряженных градиентов для системы уравнений

$$Ax = f \quad (3.1)$$

с симметричной матрицей A может быть записан следующим образом.

Выбирается начальное приближение x^0 и полагается

$$r^0 = f - Ax^0, \quad (3.2)$$

$$z^0 = r^0. \quad (3.3)$$

Далее для $k=1, 2, \dots$ производятся следующие вычисления:

$$\alpha_k = \frac{(r^{k-1}, r^{k-1})}{(Az^{k-1}, z^{k-1})}, \quad (3.4)$$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k z^{k-1}, \quad (3.5)$$

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_k Az^{k-1}, \quad (3.6)$$

$$\beta_k = \frac{(r^k, r^k)}{(r^{k-1}, r^{k-1})}, \quad (3.7)$$

$$z^k = r^k + \beta_k z^{k-1}, \quad (3.8)$$

где x^0 – вектор начального приближения; x^k – вектор решения на k -й (текущей) итерации; r^k – вектор невязки на k -й (текущей) итерации; z^k – вектор спуска (сопряженное направление) на k -й итерации; α_k, β_k – коэффициенты.

Выход из итерационного процесса (3.4)–(3.8) осуществляется либо по условию малости относительной невязки:

$$\frac{\|r^k\|}{\|f\|} < \varepsilon, \quad (3.9)$$

либо (аварийно) по превышению максимально допустимого числа итераций.

Для ускорения сходимости итерационных методов обычно используют *предобусловливание* матрицы системы. Одним из методов предобусловливания является так называемый *метод неполной факторизации* матрицы. Он заключается в том, что подбирается такая матрица M , что $M^{-1} \approx A^{-1}$, и при этом процедура решения СЛАУ вида $Mq = p$ является не слишком трудоёмкой. Нетрудно показать, что для симметричной положительно определённой матрицы $M = SS^T$ итерационный процесс (3.2)–(3.8) можно применить к предобусловленной матрице $S^{-1}AS^{-T}$ и представить в виде:

$$r^0 = f - Ax^0, \quad (3.10)$$

$$z^0 = M^{-1}r^0. \quad (3.11)$$

Далее для $k=1, 2, \dots$ производятся следующие вычисления:

$$\alpha_k = \frac{\left(M^{-1} r^{k-1}, r^{k-1} \right)}{\left(A z^{k-1}, z^{k-1} \right)}, \quad (3.12)$$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k z^{k-1}, \quad (3.13)$$

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_k A z^{k-1}, \quad (3.14)$$

$$\beta_k = \frac{\left(M^{-1} r^k, r^k \right)}{\left(M^{-1} r^{k-1}, r^{k-1} \right)}, \quad (3.15)$$

$$z^k = M^{-1} r^k + \beta_k z^{k-1}. \quad (3.16)$$

В лабораторной работе мы рассмотрим два способа построения матрицы неполной факторизации.

5. Для *диагонального* предобусловливания выбирается $M = D$, где D – главная диагональ матрицы A . Для предобусловливания *неполным разложением Холецкого* выбирается $M = SS^T$, которая строится по формулам полного разложения Холецкого с условием, что портрет нижнетреугольной матрицы S совпадает с портретом матрицы A , т. е. все ненулевые элементы, которые должны были бы получиться на месте нулевых (по портрету) элементов матрицы A , принудительно задаются равными нулю.

Заметим, что в выражениях (3.15) и (3.16) не требуется построение матрицы M^{-1} , а предполагается решать СЛАУ $Mq^k = r^k$, где q^k – некоторый вспомогательный вектор.

ПРИМЕНЕНИЕ МСГ ДЛЯ СЛАУ С НЕСИММЕТРИЧНОЙ МАТРИЦЕЙ

Если необходимо решать СЛАУ с несимметричной матрицей, то одним из вариантов (часто далеко не самым лучшим) может быть следующий. Так как метод сопряженных градиентов применим

только для симметричных матриц, то несимметричную систему уравнений $Ax = f$ необходимо преобразовать к СЛАУ с симметричной матрицей. Это можно сделать, умножив слева систему уравнений на матрицу A^T (безусловно, итерационная процедура должна строиться так, чтобы не было необходимости хранить матрицу $A^T A$). Рассмотрим итерационную процедуру для предобусловленной конечноэлементной СЛАУ $Bu = g$, построенную на основе метода сопряженных градиентов. Итак, вместо исходной конечноэлементной СЛАУ $Ax = f$ будем решать СЛАУ $Bu = g$, в которой

$$B = \left(L^{-1} A U^{-1} \right)^T L^{-1} A U^{-1} = U^{-T} A^T L^{-T} L^{-1} A U^{-1},$$

$$y = Ux, \quad g = U^{-T} A^T L^{-T} L^{-1} f,$$

где матрицы L и U соответственно нижняя треугольная и верхняя треугольная матрицы неполной факторизации исходной матрицы A .

Тогда формулы метода сопряженных градиентов (3.2)–(3.8) преобразуются к следующему виду.

Выбирается начальное приближение x^0 и полагается

$$\tilde{r}^0 = U^{-T} A^T L^{-T} L^{-1} f - U^{-T} A^T L^{-T} L^{-1} A U^{-1} U x^0 = U^{-T} A^T L^{-T} L^{-1} (f - A x^0) \quad (3.17)$$

$$\tilde{z}^0 = \tilde{r}^0, \quad \tilde{x}^0 = U x^0. \quad (3.18)$$

Далее для $k = 1, 2, \dots$ производятся следующие вычисления:

$$\tilde{\alpha}_k = \frac{(\tilde{r}^{k-1}, \tilde{r}^{k-1})}{(U^{-T} A^T L^{-T} L^{-1} A U^{-1} \tilde{z}^{k-1}, \tilde{z}^{k-1})}, \quad (3.19)$$

$$\tilde{x}^k = \tilde{x}^{k-1} + \tilde{\alpha}_k \tilde{z}^{k-1}, \quad (3.20)$$

$$\tilde{r}^k = \tilde{r}^{k-1} - \tilde{\alpha}_k U^{-T} A^T L^{-T} L^{-1} A U^{-1} \tilde{z}^{k-1}, \quad (3.21)$$

$$\tilde{\beta}_k = \frac{(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k)}{(\tilde{r}^{k-1}, \tilde{r}^{k-1})}, \quad (3.22)$$

$$\tilde{z}^k = \tilde{r}^k + \tilde{\beta}_k \tilde{z}^{k-1}. \quad (3.23)$$

По окончании итерационного процесса вектор решения вычисляется следующим образом:

$$x = U^{-1} \tilde{x}. \quad (3.24)$$

ЛОКАЛЬНО-ОПТИМАЛЬНАЯ СХЕМА

Безусловно, кроме адаптации метода сопряжённых градиентов существуют и специальные методы, применимые к СЛАУ с несимметричными матрицами. Одна из таких схем, называемая локально-оптимальной, была предложена Ю.Г. Соловейчиком в 1993 г, и для СЛАУ $Ax = f$ (возможно не с симметричной матрицей A) она выглядит следующим образом.

Выбирается начальное приближение x^0 и полагается

$$r^0 = f - Ax^0, \quad (3.25)$$

$$z^0 = r^0,$$

$$p^0 = Az^0.$$

Далее для $k = 1, 2, \dots$ производятся следующие вычисления:

$$\alpha_k = \frac{(p^{k-1}, r^{k-1})}{(p^{k-1}, p^{k-1})}, \quad (3.26)$$

$$x^k = x^{k-1} + \alpha_k z^{k-1}, \quad (3.27)$$

$$r^k = r^{k-1} - \alpha_k p^{k-1}, \quad (3.28)$$

$$\beta_k = -\frac{(p^{k-1}, Ar^k)}{(p^{k-1}, p^{k-1})}, \quad (3.29)$$

$$z^k = r^k + \beta_k z^{k-1}, \quad (3.30)$$

$$p^k = Ar^k + \beta_k p^{k-1}, \quad (3.31)$$

где $p^k = Az^k$ – вспомогательный вектор, который вычисляется не умножением матрицы на вектор, а пересчитывается рекуррентно.

Процесс заканчивается, если величина (r^k, r^k) (квадрат нормы невязки) стала достаточно малой. При этом квадрат нормы невязки можно вычислять с помощью рекуррентного соотношения

$$(r^k, r^k) = (r^{k-1}, r^{k-1}) - \alpha_k^2 (p^{k-1}, p^{k-1}). \quad (3.32)$$

Можно показать, что при использовании матриц неполной факторизации L и U (соответственно нижняя и верхняя треугольные матрицы неполной факторизации исходной матрицы A), локально оптимальная схема (3.25)–(3.32) (при применении ее к СЛАУ с матрицей $L^{-1}AU^{-1}$) преобразуется к следующему виду.

Выбирается начальное приближение x^0 и полагается

$$\tilde{r}^0 = L^{-1}(f - Ax^0), \quad (3.33)$$

$$\hat{z}^0 = U^{-1}\tilde{r}^0, \quad \hat{p}^0 = L^{-1}A\hat{z}^0. \quad (3.34)$$

Далее для $k = 1, 2, \dots$ производятся следующие вычисления:

$$\tilde{\alpha}_k = \frac{(\hat{p}^{k-1}, \tilde{r}^{k-1})}{(\hat{p}^{k-1}, \hat{p}^{k-1})}, \quad (3.35)$$

$$x^k = x^{k-1} + \tilde{\alpha}_k \hat{z}^{k-1}, \quad (3.36)$$

$$\tilde{r}^k = \tilde{r}^{k-1} - \tilde{\alpha}_k \hat{p}^{k-1}, \quad (3.37)$$

$$\tilde{\beta}_k = -\frac{\left(\hat{p}^{k-1}, L^{-1}AU^{-1}\tilde{r}^k\right)}{\left(\hat{p}^{k-1}, \hat{p}^{k-1}\right)}, \quad (3.38)$$

$$\hat{z}^k = U^{-1}\tilde{r}^k + \tilde{\beta}_k \hat{z}^{k-1}, \quad (3.39)$$

$$\hat{p}^k = L^{-1}AU^{-1}\tilde{r}^k + \tilde{\beta}_k \hat{p}^{k-1}. \quad (3.40)$$

Процесс заканчивается, если величина $\left(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k\right)$ стала достаточно малой, причем $\left(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k\right)$ можно вычислять по рекуррентной формуле

$$\left(\tilde{r}^k, \tilde{r}^k\right) = \left(\tilde{r}^{k-1}, \tilde{r}^{k-1}\right) - \tilde{\alpha}_k^2 \left(\hat{p}^{k-1}, \hat{p}^{k-1}\right).$$

Практическая часть

1. Реализовать заданный преподавателем трехшаговый итерационный метод без предобусловливания, с диагональным предобусловливанием и с предобусловливанием неполным разложением Холесского с учетом следующих требований:

- матрица A задается в разреженном строчном формате в следующих текстовых файлах (разделителями записей служат пробелы или концы строк):

файл kslau – N – размерность матрицы, *maxiter* – максимальное количество итераций, ε – величина требуемой относительной невязки;

файл ig – указатели начала строк;

файл jg – номера столбцов внедиагональных элементов заданного треугольника матрицы;

файл ggl – внедиагональные элементы нижнего треугольника матрицы;

файл ggu – внедиагональные элементы верхнего треугольника матрицы (для симметричной матрицы задаётся только один файл *gg*);

файл di – диагональные элементы матрицы;

файл pr – вектор правой части;

- предусмотреть возможность решения СЛАУ большой размерности (не менее 10000). В головной программе резервировать объем памяти, необходимый для хранения исходной матрицы, матриц предобуславливания и **нужного** числа векторов;
- неполную факторизацию выполнять один раз, перед началом итерационного процесса;
- результат записывать в файл, в процессе счета выдавать на экран сообщение о номере итерации и относительную невязку.

2. Протестировать разработанные программы. Для тестирования использовать матрицы небольшой размерности, при этом вектор правой части формировать умножением тестовой матрицы на заданный вектор.

3. Сравнить по количеству итераций и времени решения метод блочной релаксации с реализованным методом на матрице, построенной по формулам (2.15) (см. п. 3, лаб. раб. № 2) и на матрице с обратным знаком внедиагональных элементов (см. п. 4, лаб. раб. № 2).

4. Повторить п. 3 для плотной матрицы Гильберта для различных размерностей.

5. Повторить п. 3 для матрицы большой размерности, выданной преподавателем.

6. Если задание предусматривает реализацию нескольких методов, сравнить их между собой.

Варианты заданий

1. Метод сопряженных градиентов для симметричной матрицы.
2. Локально-оптимальная схема для симметричной матрицы.
3. Метод сопряженных градиентов для несимметричной матрицы. Факторизация LU .
4. Метод сопряженных градиентов для несимметричной матрицы. Факторизация $LU(sq)$.

5. Локально-оптимальная схема для несимметричной матрицы. Факторизация LU .
6. Локально-оптимальная схема для несимметричной матрицы. Факторизация $LU(sq)$.
7. Сравнить МСГ и ЛОС для симметричной матрицы.
8. Сравнить для несимметричной матрицы ЛОС с разными факторизациями.
9. Сравнить для несимметричной матрицы МСГ с разными факторизациями.
10. Сравнить МСГ и ЛОС для несимметричной матрицы. Факторизация LU .
11. Сравнить МСГ и ЛОС для несимметричной матрицы. Факторизация $LU(sq)$.

Контрольные вопросы и задания

1. Метод сопряженных градиентов.
2. Локально-оптимальная схема.
3. Вывод формул предобусловливания.
4. Вычислить нижнюю треугольную матрицу неполного разло-

жения Холецкого для матрицы
$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 \\ -1 & 101 & 0 \\ -1 & 0 & 101 \end{bmatrix}.$$

5. Для матрицы из задания 4 лаб. работа № 2, правой части (1., 0, 1, 0., 1) и нулевого начального приближения выполнить одну итерацию метода сопряженных градиентов, предварительно выполнив диагональное предобусловливание СЛАУ. Результат округлить до трёх значащих цифр.

ЛАБОРАТОРНАЯ РАБОТА № 4

РЕШЕНИЕ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ МЕТОДОМ НЬЮТОНА

Цель работы

Разработать программу решения системы нелинейных уравнений (СНУ) методом Ньютона. Провести исследования метода для нескольких систем размерности от 2 до 10.

Теоретическая часть

Пусть дана СНУ в виде:

$$\begin{aligned} F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\ F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0; \\ &\dots \\ F_m(x_1, x_2, \dots, x_n) &= 0. \end{aligned} \tag{4.1}$$

Обозначим через x^k решение, полученное на k -й итерации процесса Ньютона (для первой итерации x^0 – начальное приближение). Запишем исходную систему в виде $F_i(x^k + \Delta x) = 0$, $i = 1 \dots m$, где $\Delta x^k = \bar{x} - x^k$, \bar{x} – искомое решение. Выполним линеаризацию i -го уравнения системы (4.1) с использованием его разложения в ряд Тейлора в окрестности точки x^k :

$$F_i(x) \approx F_i(x^k) + \sum_{j=1}^n \left. \frac{\partial (F_i(x))}{\partial x_j} \right|_{x=x^k} \Delta x_j^k, \quad i = 1 \dots m,$$

или в матричном виде:

$$A^k \Delta x^k = -F^k, \tag{4.2}$$

где F^k – значение вектор-функции F при $x = x^k$; A^k – матрица

Якоби
$$\left(A_{ij}^k = \frac{\partial (F_i(x))}{\partial x_j} \bigg|_{x=x^k} \right).$$

Это система уравнений, линейных относительно приращений Δx_j^k . Решив эту систему, найдем направление Δx^k поиска решения.

Для поиска следующего приближения x^{k+1} вдоль направления Δx^k организуем итерационный процесс:

$$x_v^{k+1} = x^k + \beta_v^k \Delta x^k,$$

где β_v^k – параметр итерационного процесса поиска x^{k+1} , ($0 < \beta^k < 1$), v – номер итерации поиска оптимального значения β^k . Параметр β^k будем искать следующим образом: сначала (т. е. после нахождения направления Δx^k) β^k принимается равным 1 и вычисляется значение $F_v^k = F(x^k + \beta_v^k \Delta x^k)$; далее, пока норма F_v^k больше, чем норма F^{k-1} , β_v^k уменьшается вдвое.

Заметим, что в СЛАУ (4.2) матрица A^k при несовпадении числа неизвестных и числа уравнений становится прямоугольной. В этом случае вместо СЛАУ (4.2) решают другую (измененную) СЛАУ с квадратной матрицей, решение которой является решением (4.2). Несколько примеров формирования измененной СЛАУ приведено в вариантах заданий.

Практическая часть

1. Реализовать метод Ньютона решения СЛУ для указанных вариантов симметризации матрицы с учетом следующих требований:

- точность решения СЛУ, максимальное количество итераций и начальное приближение читать из файлов;
- элементы матрицы Якоби A и компоненты вектора F вычислять в отдельном модулях;

- при решении СЛАУ использовать метод, разработанный в лабораторной работе № 1;
- выход из итерационного процесса выполнять, если:
 - значение β^k стало меньше заданного параметра ε_1 ;
 - значение $\|F^k\|/\|F^0\|$ стало меньше заданного параметра ε_2 ;
 - достигли максимального количества итераций;
- предусмотреть аварийный выход из итерационного процесса, если невозможно решить СЛАУ;
- результат записывать в файл в формате, соответствующем хранению начального приближения.
- в процессе счета выдавать на экран сообщение о номере текущей итерации, значение β^k , координаты текущего приближения x^k , норму вектора F^k .

2. Протестировать разработанную программу.

3. Провести исследование сходимости реализованных методов на двумерных тестах:

- даны две окружности, которые:

- а) не пересекаются;
- б) пересекаются в одной точке;
- в) пересекаются в двух точках.

Исследовать зависимость метода Ньютона от начального приближения, если:

- начальное приближение не лежит на осях симметрии (показать, что первый шаг производится на ось симметрии и в каких случаях);
- начальное приближение лежит на оси, соединяющей центры окружностей;
- начальное приближение лежит на оси, перпендикулярной оси соединяющей центры окружностей и пересекающей ее на равных расстояниях от центров окружностей;
- начальное приближение лежит в центре или внутри одной из окружностей;
- исследовать влияние на сходимость добавления к системе из двух окружностей еще одного уравнения (например, уравнения прямой);

- даны три попарно пересекающиеся прямые. Исследовать сходимость метода в зависимости от начальных приближений;
- исследовать влияние взвешивания уравнений СНУ (умножения уравнений СНУ на некоторые веса);
- исследовать сходимость метода Ньютона для СНУ с локальными минимумами в зависимости от начальных приближений (например, на СНУ, состоящей из синусоиды и прямой с некоторым наклоном, которая пересекает синусоиду);
- исследовать влияние размера шага при численном вычислении производных на сходимость метода Ньютона.

При проведении исследований необходимо подтверждать получаемые результаты и выводы таблицами с координатами траектории, невязкой (нормой вектора F) и параметром β^k , а также с использованием графического изображения хода исследования, который предполагает визуализацию:

- траекторий движения метода Ньютона;
- графиков (в двумерном случае) и/или поверхностей уравнений, входящих в СНУ;
- невязки, которую в двумерном случае можно изображать изолиниями и/или цветовой градацией нормы вектора F .

Варианты заданий

1. $m \leq n$. Для нахождения Δx^k , являющегося решением системы (4.2), фиксировать как нулевые те ее $(n - m)$ компонентов

с номерами j , для которых $\max_i \left(\left| \frac{\partial (F_i(x^k))}{\partial x_j} \right| \right)$ минимальны.

Производные при формировании матрицы Якоби вычислять аналитически.

2. $m \geq n$. Для нахождения Δx^k из системы (4.2) те ее $(m - n)$ уравнений, для которых абсолютные значения $F_i(x^k)$ минимальны, исключаются из системы. При вычислении нормы вектора

F^k в процессе подбора параметра β^k учитывать все уравнения системы. Производные при формировании матрицы Якоби вычислять аналитически.

3. $m \geq n$. Для нахождения Δx^k из системы (4.2) для тех ее $(m - n + 1)$ уравнений, для которых абсолютные значения $F_i(x^k)$ минимальны, проводится свертка. Процедура свертки заключается в следующем. Вместо исключаемых уравнений берется уравнение, получающееся возведением в квадрат исключаемых уравнений и их сложением. Производные при формировании матрицы Якоби вычислять аналитически.

4. $m \geq n$. Для нахождения Δx^k из системы (4.2) применить процедуру симметризации СЛАУ, заключающуюся в следующем. Вместо исходной системы должна решаться система $(A^k)^T A^k \Delta x^k = -(A^k)^T F^k$. Производные при формировании матрицы Якоби вычислять аналитически.

5. В задании 1 производные при формировании матрицы Якоби вычислять численно.

6. В задании 2 производные при формировании матрицы Якоби вычислять численно.

7. В задании 3 производные при формировании матрицы Якоби вычислять численно.

8. В задании 4 производные при формировании матрицы Якоби вычислять численно.

Контрольные вопросы и задания

1. Сходимость метода Ньютона. Глобальные и локальные минимумы невязки.

2. На одномерном примере поясните возможность расхождения метода и необходимость введения параметра β^k .

3. Может ли СЛАУ (4.2) быть вырожденной при совпадении числа уравнений и неизвестных? Если ответ да, то что необходимо делать в этом случае? Если нет, то докажите это.