

Требования и рекомендации по заданию 2 (1 курс, 2 семестр)

Второе задание — итерационные методы для систем линейных уравнений. Вычисление решения с путем последовательных приближений.

Описание математических вычислительных алгоритмов

Пусть дана система линейных уравнений вида

$$Ax = b,$$

где A — квадратная $n \times n$ матрица, b — заданный вектор правой части, x — искомое решение. Итерационные методы решения подобных систем состоят в вычислении по следующей схеме:

1. Выбирается некоторое начальное приближение к решению $x^0 = (x_0^0, \dots, x_{n-1}^0)$.
2. Выполняется некоторое количество итераций пересчета приближений к решению

$$x^{k+1} = F(x^k, b), \quad k = 1, 2, \dots$$

где F — некоторая функция, определяющая конкретный метод вычислений.

3. Итерации п. 2 производятся до выполнения некоторого критерия останова, например, условия выполнения всех уравнений системы с заданной точностью $\|Ax^k - b\| < \varepsilon$. Полученное приближение x^k и считается решением системы.

Следует отметить, что сходимость приближений x^k к некоторому предельному вектору определяется множеством различных факторов, и в некоторых случаях такой сходимости может и не быть. Обычно в теории итерационных методов описываются классы матриц и методика выбора параметров алгоритмов так, чтобы сходимость имела место. В нашем случае мы не углубляемся в теорию, а лишь пробуем реализацию именной алгоритмической стороны итерационных методов. Замечания по поводу сходимости будут даны ниже при описании конкретных методов.

Метод простой итерации.

Итерации выполняются по формуле

$$x^{k+1} = x^k - \alpha(Ax^k - b), \quad k = 1, 2, \dots$$

α — параметр алгоритма. Теория говорит, что метод будет сходиться оптимальным образом, если параметр выбирается как $\alpha = \frac{2}{m+M}$, где m, M соответственно минимальное и максимальное собственные значения положительно определенной матрицы A . Для незнакоопределенных матриц сходимость не гарантируется и обычно ее и нет. Про оценку собственных значений матрицы см. ниже.

Метод скорейшего спуска.

Итерации выполняются по формуле

$$x^{k+1} = x^k - \alpha(Ax^k - b), \quad k = 1, 2, \dots,$$

но параметр α выбирается при этом на каждом шаге как $\alpha = (r^k, r^k)/(Ar^k, r^k)$, где (a, b) — скалярное произведение векторов a и b , $r^k = Ax^k - b$. Метод сходится для симметричных положительно определенных матриц A .

Метод Зейделя (Гаусса–Зейделя).

Итерационные приближения находятся из системы уравнений

$$A_U x^{k+1} = b - A_L x^k,$$

где A_U есть верхняя треугольная часть матрицы A , включая главную диагональ, а A_L есть нижняя треугольная поддиагональная часть матрицы A , т.е. $A = A_U + A_L$. На деле решение

данной системы для нахождения x^{k+1} сводится к обратной подстановке метода Гаусса после приведения исходной матрицы к треугольному виду. Только здесь мы переносим в правую часть еще соответствующие компоненты от умножения нижней треугольной части матрицы на предыдущее приближение x^k . Метод заведомо сходится для положительно определенных матриц, но может сходиться и для других матриц. При этом сходимость может появиться или исчезнуть при перестановке уравнений системы.

Оценка собственных значений матрицы.

Непосредственное вычисление собственных значений — это задача не менее сложная, чем решение системы. Поэтому можно примерять некоторые оценки. Наиболее простой способ основан на теореме о кругах Гершгорина, которую можно сформулировать примерно так:

Собственные значения матрицы A лежат на комплексной плоскости в объединении кругов S_i с центрами в точках a_{ii} и радиусами $R_i = \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$.

Например, для матрицы

$$\begin{pmatrix} 5 & 3 & -1 \\ 2 & 7 & 2 \\ 1 & -4 & 10 \end{pmatrix}$$

получаем, что действительные части собственных значений лежат в диапазоне $[1, 15]$, и для метода простой итерации можно взять параметр $\alpha = \frac{1}{8}$;

Точно так же можно проверять матрицу на положительную определенность (действительная часть собственных значений строго больше нуля).

Ленточные матрицы.

Итерационные методы оказываются весьма эффективными для решения систем с ленточными матрицами, т.е. такими, у которых в каждой строке только несколько элементов отличны от нуля и эти элементы расположены на некоторых диагоналях матрицы. Подобные системы возникают при численном решении дифференциальных уравнений, но об этом мы здесь не говорим.

Причина понятна — умножение ленточной матрицы на вектор можно выполнить очень быстро, так как не надо умножать на нулевые элементы. Поэтому помимо реализации итерационных методов “в лоб” можно проверить как они работают для ленточных матриц, применив аккуратное умножение такой матрицы на вектор. Естественно, для этого надо знать специфику структуры матрицы. Например, можно рассмотреть семейство трехдиагональных матриц, семейство k -диагональных матриц, для которых известно где расположены эти диагонали и т.п. Также распространены подходы с разреженными матрицами, когда матрица представляется не двумерным массивом, а некоторой структурой, в которой явно описаны значения и индексы ненулевых элементов каждой строки.