УДК 519.612

В. С. Абрамчук*, канд. фіз.-мат. наук,
І. В. Абрамчук,** старший викладач

* Вінницький державний педагогічний університет
імені М. Коцюбинського, м. Вінниця,
**Вінницький національний технічний університет, м. Вінниця

ДОСЛІДЖЕННЯ ШВИДКОСТІ ЗБІЖНОСТІ КЛАСИЧНИХ ІТЕРАЦІЙНИХ МЕТОДІВ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ СИСТЕМ $A\vec{x}=\vec{b}$ ВЕЛИКИХ ПОРЯДКІВ

Досліджено умови, які спричиняють сповільнення швидкості збіжності ітераційних методів розв'язування систем $A\vec{x}=\vec{b}$ та умови, що дозволяють прискорити збіжність процесу.

Ключові слова: *метод похибок, нев'язок, найшвидшого зменшення нев'язок, найшвидшого спуску, Гауса-Зейделя.*

Не розв'язані проблеми. Основною проблемою розв'язування систем $A\vec{x}=\vec{b}$ з дійсними квадратними невиродженими матрицями великих порядків $10^6 — 10^9$ з довільним розташуванням ненульових елементів є побудова ефективних ітераційних методів, що збігаються для всіх $A\in M_n\left(R\right)$, $\boldsymbol{rank}\, A=n$.

Другою не розв'язаною проблемою є побудова алгоритмів, що коректують процес збіжності і забезпечують стійкість обчислювального процесу в умовах похибок заокруглення.

Сучасні ітераційні методи будуються на основі узагальнення класичних методів, що широко застосовуються при розв'язуванні різницевих і сіткових рівнянь [5—8; 10—16].

Серед класичних ітераційних методів виділимо метод мінімальних похибок, найшвидшого зменшення нев'язки, мінімальних нев'язок і найшвидшого спуску [5]. Дослідимо прискорення швидкості збіжності цих методів, а також методу Гауса-Зейделя при розв'язуванні сіткових рівнянь. Не дивлячись на всебічне вивчення і узагальнення цих методів, недостатньо досліджені умови, що прискорюють їх швидкість збіжності.

Нехай лінійний однокроковий ітераційний метод

$$\vec{u}^{(k)}=\vec{u}^{(k-1)}-\tau_k H\left(A\vec{u}^{(k-1)}-\vec{f}\right)=G_{\tau_k}\vec{u}^{(k-1)}+\vec{b}\ ,\ k=1,2,\dots, \qquad (1)$$

є узгодженим для системи

$$A\vec{u}=\vec{f} \qquad (2)$$

з дійсною невиродженою матрицею $A \in M_n(\mathbb{R})$, де $G_{\tau_k} = I - \tau_k HA$ — матриця переходу методу (1), $\vec{b} = \tau_k H \vec{f}$, $H \in M_n(\mathbb{R})$ — невироджена матриця, $\tau_k \in \mathbb{R}$. Для вектора похибок $\vec{\varepsilon}^{(k)} = \vec{u}^{(k)} - \vec{u}^*$, $\vec{u}^* = A^{-1}\vec{f}$, ітераційний метод (1) набуває вигляду

$$\vec{\varepsilon}^{(k)} = G_{\tau_k} \vec{\varepsilon}^{(k-1)},\ k = 1, 2, ... \tag{3}$$

Для випадків

$$H = A^T,\ G_{\tau_k} = I - \tau_k A^T A,\ \tau_k = \left\| \vec{r}^{(k-1)} \right\|_2^2 \Big/ \left\| A^T \vec{r}^{(k-1)} \right\|_2^2; \tag{4}$$

$$H = A^T,\ G_{\tau_k} = I - \tau_k A^T A,\ \tau_k = \left\| A^T \vec{r}^{(k-1)} \right\|_2^2 \Big/ \left\| AA^T \vec{r}^{(k-1)} \right\|_2^2; \tag{5}$$

$$H = E,\ A = A^T > 0,\ G_{\tau_k} = I - \tau_k A,\ \tau_k = \frac{\left(A\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)} \right)}{\left\| A\vec{r}^{(k-1)} \right\|_2^2}; \tag{6}$$

$$H = E,\ A = A^T > 0,\ G_{\tau_k} = I - \tau_k A,\ \tau_k = \frac{\left\| \vec{r}^{(k-1)} \right\|_2^2}{\left(A\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)} \right)}; \tag{7}$$

ітераційний процес (1) відповідно називають методом мінімальних похибок, найшвидшого зменшення нев'язки, мінімальних нев'язок і найшвидшого спуску (SDM) [5]. Розв'язок $\vec{u}^* = A^{-1}\vec{f}$ сумісної системи (2) будемо розглядати як елемент евклідового простору E^n з скалярним добутком $\left(\vec{u}, \vec{v}\right) = \sum_{j=1}^{n} u_j v_j$, $\vec{u} = \left(u_1, ..., u_n\right) \in \mathbb{R}^n$, $\vec{v} = \left(v_1, ..., v_n\right) \in \mathbb{R}^n$. За матричну норму на $M_n\left(\mathbb{R}\right)$ виберемо спектральну норму, за число обумовленості матриці A по відношенню до спектральної норми виберемо число $\chi(A) = \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A) \big/ \lambda_{\min}(A^T A)}$.

Мета статті: знайти умови, що прискорюють ітераційний процес (1)—(3) за умов (4)—(7).

Постановка задачі. 1. Встановити умови, які забезпечують оптимальну (найкращу) швидкість збіжності процесу (1), для методів (4)—(7). Описати області $\Omega_{\max}$, $\Omega_{\min}$ найшвидшої та найповільнішої збіжності методів. 2. Обґрунтувати перспективність узагальнення методу Гауса-Зейделя для розв'язування сіткових рівнянь. 3. Визначити оптимальні параметри, що прискорюють швидкість збіжності методів. 4. Дослідити, як впливає число обумовленості матриці ***cond*** A та розподіл власних значень на швидкість збіжності ітераційних процесів (4)—(7).

Дослідження швидкості збіжності методу мінімальних похибок. Проаналізуємо процес (1) для випадку оптимізації методу мінімальних похибок за рахунок вибору послідовності оптимальних параметрів $\tau_k \in \mathbb{R}$. Ітераційний процес (4) для знаходження вектора похибки $\vec{\varepsilon}^{(k)}$ реалізується процедурою

$$\vec{\varepsilon}^{(k)} = \left(I - \tau_k A^T A\right)\vec{\varepsilon}^{(k-1)},\ k = 1, 2, \dots .$$

Позначимо через $\left\{\lambda_i(A^T A)\right\}$ множину власних значень матриці $A^T A$, а через $\{\vec{v}_i\}$ — повну ортогональну систему власних векторів матриці $A^T A$. Нехай вибраний довільний початковий вектор $\vec{u}^{(0)} \neq \vec{u}^*$. Позначимо через $H_m\left(A^T A\right) = \boldsymbol{span}\left\{\vec{v}_{i_1}, \dots, \vec{v}_{i_m}\right\}$ — підпростір власних векторів матриці $A^T A$ мінімальної розмірності, якому належить вектор $\vec{\varepsilon}^{(0)} = \vec{u}^{(0)} - \vec{u}^*$. Тоді вектор $\vec{\varepsilon}^{(0)}$ буде однозначно розкладений у підпросторі H_m: $\vec{\varepsilon}^{(0)} = \sum_{i \in I} c_i \vec{v}_i$, $\left(\forall i \in I\right)\ \left(c_i \neq 0\right)$, $I = \left\{i_1, \dots, i_m\right\}$.

Лема 1. Для довільних значень параметрів $\tau_k \in \mathbb{R}$ вектори похибок $\vec{\varepsilon}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$, методу (1) належать підпростору H_m, якому належить $\vec{\varepsilon}^{(0)}$.

Доведення. Застосуємо метод математичної індукції. Для $k = 1$ маємо

$$\vec{\varepsilon}^{(1)} = \left(I - \tau_1 A^T A\right)\vec{\varepsilon}^{(0)} = \sum_{i \in I} c_i \left(1 - \tau_1 \lambda_i\right)\vec{v}_i = \sum_{i \in I} c_i^{(1)} \vec{v}_i \in H_m,$$

де $c_i^{(0)} = c_i$, $c_i^{(1)} = c_i^{(0)}\left(1 - \tau_1 \lambda_i\right)$, $i \in I$. Допустимо, що $\vec{\varepsilon}^{(k)} \in H_m$, $k \geq 1$, тоді для вектора $\vec{\varepsilon}^{(k+1)} = \left(I - \tau_{k+1} A^T A\right)\vec{\varepsilon}^{(k)}$ матимемо

$$\vec{\varepsilon}^{(k+1)} = \sum_{i \in I} c_i^{(k+1)} \vec{v}_i \in H_m,\ c_i^{(k+1)} = c_i^{(k)}\left(1 - \tau_{k+1}\lambda_i\right), \tag{8}$$

$\lambda_i = \lambda_i\left(A^T A\right)$, $i \in I$. Доведення леми 1 завершено.

З формули (4) і леми 1 слідує оптимальний алгоритм збіжності процесу (3), з нестаціонарною матрицею $G_{\tau_k} = I - \tau_k A^T A$, який забезпечується вибором параметрів τ_k:

$$\tau_1 = \frac{1}{\lambda_{i_m}\left(A^T A\right)},\ \tau_2 = \frac{1}{\lambda_{i_{m-1}}\left(A^T A\right)}, \dots,\ \tau_m = \frac{1}{\lambda_{i_1}\left(A^T A\right)}. \tag{9}$$

де $\lambda_{i_1} \leq \lambda_{i_2} \leq \dots \leq \lambda_{i_m}$, $i_j \in I$, $j = 1, \dots, m$.

Підставивши ці значення у формулу розкладу (8) для $k = m-1$, дістанемо $\vec{\varepsilon}^{(m)} = \vec{u}^{(m)} - \vec{u}^* = 0 \Rightarrow \vec{u}^{(m)} = \vec{u}^*$.

Висновки. 1. Метод мінімальних похибок збігається при оптимальному виборі параметрів τ_i за формулою (9) для довільної невиродженої матриці A за скінчене число кроків в умовах абсолютно точних обчислень. Число кроків m залежить від вибору початкового вектора $\vec{u}^{(0)}$.

2. Для практичного забезпечення максимально швидкого процесу збіжності, необхідно щоб елементи послідовності $\left\{\tau_k^{-1}\right\}$ наближали власні значення матриці $A^T A$ на відрізку $\left[\lambda_{i_1}, \lambda_{i_m}\right]$.

3. Множиною $\Omega_{\max}$ є об'єднання усіх сингулярних прямих (площин для кратних власних значень), що визначаються власними парами $\left(\lambda_i\left(A^T A\right), \vec{v}_i\right)$ матриці $A^T A$: $S_i = \left\{\vec{u} : \ \vec{u} = \vec{u}^* + H_i\right\}$, $H_i = \boldsymbol{span}\left\{\vec{v}_{i_1}, ..., \vec{v}_{i_s}\right\}$, $A^T A \vec{v}_{i_j} = \lambda_i \vec{v}_{i_j}$, $j \in [1, s_i]$, $i \in I$, $\sum_{i \in I} s_i = n$.

4. Оптимізація процесу збіжності методу мінімальних похибок здійснюється в околі будь-якої сингулярної прямої (площини), що визначається власною парою $\left(\lambda\left(A^T A\right), \vec{\varepsilon}\right)$ матриці $A^T A$.

Порівняємо швидкість збіжності стаціонарного процесу (3) з матрицею переходу $G_\tau = I - \tau A^T A$ з оптимальною швидкістю збіжності методу з параметрами послідовності (9). Для збіжності до нуля евклідової норми вектора похибки $\vec{\varepsilon}^{(k)}$, який задовольняє (1), (3) при $\tau_k = \tau$, необхідно і досить, щоб виконувалась нерівність [14]

$$\rho\left(\tau\right) = M\left(G_\tau\right) = \max_i \left|1 - \tau\lambda_i\right| < 1 .$$

Оптимальне значення параметра τ знаходиться з умови мінімізації спектрального радіуса $\rho\left(\tau\right)$ за формулою [14]

$$\tau^* = \frac{2}{m+M}, \ \rho\left(\tau\right) = \frac{M-m}{M+m} = \left(1 - \frac{m}{M}\right) \Big/ \left(1 + \frac{m}{M}\right), \tag{10}$$

де $0 < m = \min \lambda_i\left(A^T A\right)$, $M = \max \lambda_i\left(A^T A\right)$. Взагалі, межі m, M будуть залежати від початкового вектора $\vec{\varepsilon}^{(m)}$: $m = \lambda_{i_1}$, $M = \lambda_{i_m}$ $\frac{1}{\lambda_{i_m}} < \tau^* = \frac{2}{\lambda_{i_1} + \lambda_{i_m}} < \frac{1}{\lambda_{i_1}}$. Порівнюючи оптимальні параметри τ_k з послідовності (9) з τ^* за формулою (10), встановлюємо причину більш повільної збіжності стаціонарного процесу (3), побудованого на основі мінімізації спектрального радіуса матриці $G = I - \tau A^T A$.

Перейдемо до аналізу методу мінімальних похибок з параметрами, визначеними за формулою (4).

Лема 2. Для довільних векторів $\vec{x}^{(k)}$ швидкість збіжності методу мінімальних похибок визначається коефіцієнтом

$$K_1\left(A,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = 1-\cos^2\left\{A^T A\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)},\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\},$$
$$\left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = K_1\left(A,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)\cdot\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2. \tag{11}$$

Доведення леми 2. Виконаємо перетворення:

$$\left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = \left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2 - 2\frac{\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}{\left\|A^T\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}\left(\vec{\varepsilon}^{(k-1)},A^T\vec{r}^{(k-1)}\right)+$$

$$+\left(\frac{\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}{\left\|A^T\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}\right)^2\left\|A^T\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2 = \left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2 - \frac{\left(\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2\right)^2}{\left\|A^T\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}.$$

Оскільки $\left(\vec{\varepsilon}^{(k-1)},A^T\vec{r}^{(k-1)}\right) = \left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2$, то

$$\cos^2\left\{A^T A\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)},\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} = \left(\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2\right)^2 \Big/ \left(\left\|A^T\,\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2\right),$$

тоді

$$\left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = \left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2\left(1-\left(\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2\right)^2 \Big/ \left(\left\|A^T\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2\right)\right),$$

отже $\left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = K_1\left(A,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)\cdot\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2$. Доведення леми завершене.

З формули (11) випливає, що метод мінімальних похибок збігається найповільніше для тих векторів $\vec{\varepsilon}^{(k-1)}$, для яких досягає мінімуму функціонал $\cos^2\left\{A^T A\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)},\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\}$ [1—4].

Дослідимо, за яких умов швидкість збіжності методу мінімальних похибок сповільнюється. Розкладемо вектор нев'язки $\vec{\varepsilon} = \vec{u} - \vec{x}^*$

в базисі за власними векторами матриці $A^T A$: $\vec{\varepsilon} = \sum_{i=1}^{n} c_i \vec{v}_i$, $A^T A\vec{\varepsilon} = \sum_{i=1}^{n} c_i \lambda_i \vec{v}_i$, $\|\vec{\varepsilon}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} c_i^{\,2}$, $\|A^T A\vec{\varepsilon}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} c_i^{\,2} \lambda_i^2$, $\|\vec{v}_i\|_2 = 1$, $\forall i \in [1:n]$ (власні значення $\lambda_i\left(A^T A\right)$ взяті з їх кратностями).

Максимальне відхилення за напрямком вектора $A^T A\vec{\varepsilon}$ від оптимального $\vec{\varepsilon} = \vec{u} - \vec{x}^*$ на розв'язок системи $A\vec{x} = \vec{b}$ з точки $\vec{u}$ вимірюється величиною

$$\min_{\substack{\vec{u}\in\mathbb{R}^n \\ \vec{u}\neq\vec{x}^*}} \cos^2\left\{A^T A\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\} = \min_{\substack{\vec{c}\in\mathbb{R}^n \\ \vec{c}\neq\vec{x}^*}} \cos^2\left\{A^T A\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\} = \min_{\substack{\vec{c}\in\mathbb{R}^n \\ \vec{c}\neq\vec{x}^*}} \frac{\left(A^T A\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right)^2}{\|A^T A\vec{\varepsilon}\|_2^2 \|\vec{\varepsilon}\|_2^2} =$$

$$= \min_{\substack{\vec{c}\in\mathbb{R}^n \\ \vec{c}\neq\vec{x}^*}} \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i c_i^{\,2}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n} c_i^{\,2} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 c_i^{\,2}} = \min_{\|\vec{t}\|_2 = 1} \frac{\left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i\right)^2}{\sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 t_i}, \ \vec{t} = [t_1, ..., t_n]^T, \ t_i = c_i^2 \ge 0,$$

де $i \in [1:n]$, $\left(A^T A\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i c_i^{\,2}$.

Складемо функцію Лагранжа [9]

$$L(\vec{t}, \mu) = \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i\right)^2 \Bigg/ \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 t_i - \mu \cdot g(\vec{t}), \ g(\vec{t}) = \sum_{i=1}^{n} t_i - 1 = 0, \ \forall i \in [1:n]: \ t_i \ge 0.$$

Дослідимо $L(\vec{t}, \mu)$ на умовний екстремум:

$$\frac{\partial L}{\partial t_j} = \left(2\lambda_j \sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i \cdot \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^2 t_i - \lambda_j^2 \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i\right)^2\right) \Bigg/ \left(\sum_{i=1}^{n} \lambda_i t_i\right)^2 - \mu \ge 0$$

і або $\dfrac{\partial L}{\partial t_j} = 0$, або $t_j = 0$ [9].

Виконавши перетворення, дістанемо систему лінійних алгебричних рівнянь відносно параметрів t_j, $j \in I$, де I множина індексів $j \in [1:n]$ для яких $0 < t_j < 1$:

$$\begin{cases} \sum_{i=I} \left(2\lambda_i - \lambda_j - \lambda_1\right) t_i = 0, & \forall j \in I, j > 1, \\ \sum_{i=I} t_i = 1, \end{cases}$$

де $\lambda_1\left(A^T A\right) \ge \lambda_2\left(A^T A\right) \ge ... \ge \lambda_n\left(A^T A\right)$.

Для $\lambda_1 = \lambda_{\max}\left(A^T A\right)$, $\lambda_n = \lambda_{\min}\left(A^T A\right)$, $t_2 = t_3 = ... = t_{n-1} = 0$, матимемо систему рівнянь

$$\begin{cases} \lambda_1 t_1 - \lambda_n t_n = 0, \\ t_1 + t_n = 1; \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} t_1 = \lambda_n / (\lambda_1 + \lambda_n), \\ t_n = \lambda_1 / (\lambda_1 + \lambda_n). \end{cases} \Rightarrow$$

$$\min \cos^2\left\{A^T A \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\} = \frac{4\lambda_1\lambda_n}{(\lambda_1+\lambda_n)^2} = \frac{4}{\left(\chi(A) + 1/\chi(A)\right)^2}.$$

Звідси можна зробити висновки про вплив обумовленості та розподілу власних значень матриці $A^T A$ (матриці AA^T) на прискорення та сповільнення швидкості збіжності методу мінімальних похибок.

Висновок. 5. Якщо існує кратне найменше значення $\lambda_{\min}\left(A^T A\right)$ або група малих власних значень, то за умови погано обумовленої матриці A ітераційний процес в області $\Omega_{\min}$, що визначається умовою $\left\{\vec{w} \in \mathbb{R}^n : \min \cos^2\left\{A^T A \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\} = \cos^2\left\{A^T A \vec{w}, \vec{w}\right\}\right\}$, стає повільним. Ефективність будь-якого ітераційного методу повинна визначатися стратегією виходу з області $\Omega_{\min}$ і наближенням до області $\Omega_{\max}$.

Якщо матриця A погано обумовлена $\boldsymbol{cond}\, A = \chi(A) \gg 1$, то в області $\Omega_{\min}$ метод мінімальних похибок збігається повільно з коефіцієнтом:

$$C = 1 - \min_{\|\vec{\varepsilon}\|_2 = 1} \cos^2\left\{A^T A \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\} \ge \left(\frac{1 - 1/\chi^2(A)}{1 + 1/\chi^2(A)}\right)^2, \chi(A) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}\left(A^T A\right)}{\lambda_{\min}\left(A^T A\right)}}.$$

Висновок 6. Метод мінімальних похибок можна прискорити, об'єднавши алгоритм максимізації $\cos^2\left\{A^T A \vec{r}, \vec{r}\right\}$ з процесом (4).

Збіжність методу мінімальних нев'язок у випадку симетричної додатно визначеної матриці.

Поряд з ітераційним процесом (6)

$$\vec{u}^{(k)} = \vec{u}^{(k-1)} - \tau_k \vec{r}^{(k-1)}$$

розглянемо процес для нев'язок $\vec{r}^{(k)} = A\varepsilon^{(k)} = A^T\varepsilon^{(k)}$:

$$\vec{r}^{(k)} = \vec{r}^{(k-1)} - \tau_k A^T \vec{r}^{(k-1)} \tag{12}$$

з матрицею $Z_{\tau_k} = I - \tau_k A^T$. Виберемо початковий вектор $\vec{u}^{(0)} \ne \vec{u}^*$. Позначимо через $\left\{\lambda_i(A)\right\}$ множину власних значень матриці A, а через $\left\{\vec{w}_i\right\}$ — повну ортонормовану систему відповідних власних векторів матриці A, через $H_m(A) = \boldsymbol{span}\left\{\vec{w}_{i_1},...,\vec{w}_{i_m}\right\}$ — підпростір, якому належить початковий вектор $\vec{\varepsilon}^{(0)} = \vec{u}^{(0)} - \vec{u}^*$. Тоді аналогічно до дослідження методу мінімальних похибок одержимо результати.

Лема 3. Для довільних значень параметрів $\tau_k \in \mathbb{R}$ вектори похибок $\vec{\varepsilon}^{(k)}$, $k = 1, 2, ...$, методу мінімальних нев'язок для випадку $A = A^T > 0$ належать підпростору $H_m\left(A\right)$, якому належить початковий вектор $\overrightarrow{\varepsilon^{(0)}}$.

Процес оптимізації в методі мінімальних нев'язок може бути завершений за m кроків, якщо параметри τ_k вибирати з умови:

$$\tau_1 = \frac{1}{\lambda_{i_m}(A)}, \tau_2 = \frac{1}{\lambda_{i_{m-1}}(A)}, ..., \tau_m = \frac{1}{\lambda_{i_1}(A)}. \qquad (13)$$

Якщо розглянути стаціонарний ітераційний процес (12) з матрицею $Z_\tau = I - \tau A^T = I - \tau A$, то оптимізація процесу збіжності буде забезпечуватися параметром

$$\tau^* = 2/\left(m + M\right),$$

де $0 < m = \min\limits_i \lambda_i\left(A\right)$, $M = \max\limits_i \lambda_i\left(A\right)$. Взагалі, межі m і M будуть залежати від вибору початкового вектора $\vec{\varepsilon}^{(0)}$: $m = \lambda_{i_1}\left(A\right)$, $M = \lambda_{i_m}\left(A\right)$.

Щоб дослідити швидкість збіжності методу мінімальних нев'язок, необхідно дослідити евклідову норму похибки.

Лема 4. Для симетричної додатно визначеної матриці $A = B^T B$ швидкість збіжності методу мінімальних нев'язок у довільній точці $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ є лінійною в евклідовій метриці і визначається коефіцієнтом

$$K_2\left(A, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = K_2\left(B^T B, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = 1 - \cos^2\left\{AA\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \times$$

$$\times \cos^2\left\{BA\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, B\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \cdot \cos^2\left\{A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \times$$

$$\times\left(2 - \cos^2\left\{AA\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \cdot \cos^2\left\{BA\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, B\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\}\right)$$

$$\left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = K_2\left(A, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2. \qquad (14)$$

Доведення леми 4. На основі формули (6) маємо

$$\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^{*} = \vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}^{*} - \frac{\left(A\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)}\right)}{\left\|A\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}\vec{r}^{(k-1)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = \left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2 \left(1 - \frac{\left(A\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)}\right)}{\left\|A\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2} \cdot \frac{\left(\vec{r}^{(k-1)}, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)}{\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2} \times \right.$$

$$\left. \times \left(2 - \frac{\left(A\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)}\right)}{\left\|A\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2} \cdot \frac{\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}{\left(\vec{r}^{(k-1)}, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)}\right)\right).$$

Використавши симетрію матриці $A = A^T$, виконаємо перетворення

$$\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2 = \left(B^T B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, B^T B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = \left(BA\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)$$

$$\left(A\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)}\right) = \left(B^T BB^T B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, B^T B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) =$$

$$= \left(BB^T B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, BB^T B\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = \left\|BA\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2,$$

$$\left(\vec{r}^{(k-1)}, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = \left(B^T B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = \left\|B\,\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2, \qquad (15)$$

Підставимо (15) у $K_2\left(A, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)$, дістанемо формулу (14). Доведення леми 4 завершене.

Висновок 7. Оптимальна швидкість збіжності (збіжність за один крок) методу мінімальних нев'язок досягається на власних прямих $S_i = \left\{\vec{x} : \quad x = \vec{x}^{*} + t\,\vec{\varepsilon}_i\right\}$, $t \in \mathbb{R}$, $B^T B\,\vec{\varepsilon}_i = \lambda_i \vec{\varepsilon}_i$, оскільки кожна власна пара матриці $A = B^T B$ визначає власну пару матриць A^2, BA.

Якщо не оптимізувати процес збіжності методу мінімальних нев'язок, то він може збігатись повільніше від методу мінімальних похибок, оскільки коефіцієнт збіжності K_2 може бути значно більшим K_1: $0 < K_1 \le K_2 < 1$.

Метод найшвидшого зменшення нев'язки. Якщо параметри τ_k визначити за формулою (5)

$$\tau_k = \left\|A^T\,\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2 \Big/ \left\|AA^T\,\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2 = 1 \Big/ \rho\left(A^T A, A^T\vec{r}^{(k-1)}\right),$$

то процедура мінімізації норми нев'язок ітераційного процесу $\vec{u}^{(k)} = \vec{u}^{(k-1)} - \tau_k A^T \vec{r}^{(k-1)}$ збігається для довільних невироджених матриць A. Результати досліджень швидкості збіжності методу (5) сформулюємо як висновки леми.

Лема 5. Для довільної невиродженої матриці $A \in M_n(\mathbb{R})$ швидкість збіжності методу найшвидшого зменшення нев'язок у довільній точці $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ є лінійною в евклідовій метриці і визначається коефіцієнтом

$$K_3\left(A, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = 1 - \cos^2\left\{AA^T A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \times$$
$$\times \cos^2\left\{A^T A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \cdot \left(2 - \cos^2\left\{AA^T A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\}\right)$$
$$\left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = K_3\left(A, \vec{\varepsilon}^{(k)}\right)\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2. \quad (16)$$

Доведення проводиться на основі дослідження квадрату евклідової норми вектора похибок.

Метод найшвидшого спуску (SDM). Дослідимо швидкість збіжності методу (7) для симетричної додатно визначеної матриці $A = B^T B$:

$$\vec{\varepsilon}^{(k)} = \vec{\varepsilon}^{(k-1)} - \frac{\left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2}{\left(A\vec{r}^{(k-1)}, \vec{r}^{(k-1)}\right)} \vec{r}^{(k-1)}.$$

Лема 6. Для симетричної додатно визначеної матриці $A = B^T B$, швидкість збіжності методу найшвидшого спуску у довільній точці $x^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ є лінійною в евклідовій метриці і визначається коефіцієнтом

$$K_4\left(A, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = K_4\left(B^T B, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right) = 1 - \left\{\cos^2 BA\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, B\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \times$$
$$\times \cos^2\left\{A\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\} \cdot \left(2 - \cos^2\left\{BA\vec{\varepsilon}^{(k-1)}, B\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\}\right),$$
$$\left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2 = K_4\left(A, \vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right)\left\|\vec{\varepsilon}^{(k-1)}\right\|_2^2. \quad (17)$$

Доведення леми ґрунтується на співвідношеннях (15).

Висновок 8. Методи мінімальних похибок (4), найшвидшого спуску (7), мінімальних нев'язок (6), найшвидшого зменшення нев'язок (5), мають лінійну швидкість збіжності. Для погано обумовлених матриць, існують області повільної швидкості збіжності $\Omega_{\min}$, які визначаються умовами $\min\limits_{\|\vec{\varepsilon}\|=1} \cos^2\left\{BA\vec{\varepsilon}, B\vec{\varepsilon}\right\}$, $\min\limits_{\|\vec{\varepsilon}\|=1} \cos^2\left\{A^T A\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\}$.

Управління швидкістю збіжності методів (4)—(7) на основі максимізації функціоналу $\cos^2\left\{A^T A\, \vec{r}, \vec{r}\right\}$ дозволяє прискорити їх швидкість збіжності.

Покажемо, що коефіцієнти збіжності методів (4)—(7) є деякими многочленними виразами. Нехай A — симетрична додатно визначена матриця, $A = B^T B$ (або BB^T).

Доведемо, що $\min\limits_{\|\vec{\varepsilon}\|_2=1} \cos^2\left\{B^T B\,\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\} = \min\limits_{\|\vec{\varepsilon}\|_2=1} \cos^2\left\{BB^T B\,\vec{\varepsilon}, B\,\vec{\varepsilon}\right\}$ (аналогічно $\min\limits_{\|\vec{\varepsilon}\|_2=1} \cos^2\left\{BB^T \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\} = \min\limits_{\|\vec{\varepsilon}\|_2=1} \cos^2\left\{B^T BB^T\, \vec{\varepsilon}, B^T\, \vec{\varepsilon}\right\}$). Розкладемо вектор $\vec{\varepsilon}$ по системі власних векторів матриці $B^T B$, $\vec{\varepsilon} = \sum\limits_{i=1}^{n} c_i \vec{v}_i$, $B^T B\vec{v}_i = \lambda_i \vec{v}_i$ (власні значення $\lambda_i(B^T B)$ взяті з їх кратностями): $B^T B\,\vec{\varepsilon} = \sum\limits_{i=1}^{n} c_i \lambda_i \vec{v}_i$. Вираз $\cos^2\left\{BB^T B\,\vec{\varepsilon}, B\,\vec{\varepsilon}\right\}$ перетворимо так:

$$\cos^2\left\{BB^T B\,\vec{\varepsilon}, B\,\vec{\varepsilon}\right\} = \frac{\left(BB^T B\,\vec{\varepsilon}, B\,\vec{\varepsilon}\right)^2}{\left\|BB^T B\,\vec{\varepsilon}\right\|_2^2 \left\|B\,\vec{\varepsilon}\right\|_2^2} = \frac{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} c_i^2 \lambda_i^2\right)^2}{\sum\limits_{i=1}^{n} c_i^2 \lambda_i \cdot \sum\limits_{i=1}^{n} c_i^2 \lambda_i^3}.$$

Позначимо $t_i = c_i^2 \lambda_i \geq 0$, $i \in [1:n]$, тоді

$$\min_{\|\vec{\varepsilon}\|=1} \cos^2\left\{BB^T B\,\vec{\varepsilon}, B\,\vec{\varepsilon}\right\} = \min_{\|\vec{t}\|=1} \frac{\left(\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i t_i\right)^2}{\sum\limits_{i=1}^{n} \lambda_i^2 t_i}, \quad \vec{t} = [t_1, \ldots, t_n]^T.$$

Заміною змінних вираз $\cos^2\left\{BB^T B\,\vec{\varepsilon}, B\,\vec{\varepsilon}\right\}$ приведений до еквівалентного виразу для $\cos^2\left\{BB^T \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\}$, що означає рівність їх екстремальних значень. Таким чином, коефіцієнти збіжності методів (4)—(7) в області $\Omega_{\min}$ можна подати як многочленні вирази:

$$\begin{aligned}
&\min K_1\left(A^T A, \vec{\varepsilon}\right) = 1 - \psi, \quad \psi = \min\cos^2\left\{A^T A\,\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\};\\
&\min K_2\left(BB^T, \vec{\varepsilon}\right) = 1 - \psi^3(2 - \psi^2), \quad \psi = \min\cos^2\left\{BB^T \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\};\\
&\min K_3\left(A^T A, \vec{\varepsilon}\right) = 1 - \psi^2(2 - \psi), \quad \psi = \min\cos^2\left\{A^T A\,\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\};\\
&\min K_4\left(BB^T, \vec{\varepsilon}\right) = 1 - \psi^2(2 - \psi), \quad \psi = \min\cos^2\left\{BB^T \vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\right\},
\end{aligned} \tag{18}$$

де $B^T B = A$.

З формули (18) випливає теоретичне обґрунтування практичних висновків, які отримані на основі тестових досліджень в роботах [6; 10]: сповільнення швидкості збіжності ітераційних методів розв'язання системи рівнянь $A\vec{x} = \vec{b}$ залежить, як від обумовленості матриці A, так і від групування власних значень. Якщо наближатись до області $\Omega_{\max}$, де $\psi = \max\cos^2\{C\vec{\varepsilon}, \vec{\varepsilon}\} \to 1$, то швидкість збіжності методів (4)—(7) буде прискорюватись, оскільки коефіцієнти збіжності $K_i \to 0$, $\forall i = 1,2,3,4$.

Одержані результати дають змогу побудувати алгоритм мінімальних похибок (аналогічно мінімальних нев'язок, найшвидшого зменшення нев'язки, найшвидшого спуску) з керуванням процесу збіжності.

Алгоритм. 1. Вибрати довільний вектор $\vec{x}^{(0)}$ і виконати декілька ітерацій [4] для наближення до області $\Omega_{\max}$ в кулі $\left\|\vec{x} - \vec{x}^*\right\|_2 \le \left\|\vec{x}^{(0)} - \vec{x}^*\right\|_2$. Знайдений вектор позначити через $\vec{u}^{(0)}$.

2. Для $k = 1,2,...$ виконати (алгоритм мінімальних похибок (1), (4))

$$\vec{u}^{(k)} = \vec{u}^{(k-1)} - \tau_k A^T \vec{r}^{(k-1)}, \; \tau_k = \left\|\vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2 \Big/ \left\|A^T \vec{r}^{(k-1)}\right\|_2^2$$

з аналізом значення функціоналу $\cos^2\left\{AA^T \vec{r}^{(k)}, \vec{r}^{(k)}\right\} = c^{(k)}$.

Якщо $c^{(k)} < \varepsilon_0$ $(\varepsilon < 0.5)$ то, поклавши $\vec{x}^{(0)} = \vec{u}^{(k-1)}$, перейти на п.1.

У протилежному випадку.

3. Виконати один із тестів на збіжність [4; 15] і перейти на п.2.

Аналогічно записується алгоритм для методу мінімальних нев'язок, найшвидшого зменшення нев'язки, найшвидшого спуску.

Умови прискорення швидкості збіжності ітераційного методу Гауса-Зейделя. Ітераційний процес Гауса-Зейделя наближеного розв'язування системи $A\vec{x} = \vec{b}$, $A \in M_n(\mathbb{R})$, $\vec{b} \in \operatorname{int}(A)$, $\boldsymbol{rank}\, A = n$, з використанням базису $E = \{\vec{e}_i\}_{i=1}^n$ одиничних векторів, має за мету обнуління компонент вектора нев'язки.

Нехай вектор $\vec{x}^{(0)} \neq \vec{x}^*$ — довільний вектор простору $\mathbb{R}^n$. Виберемо таку пару одиничних векторів $\vec{e}_i^{(0)}$, $\vec{e}_j^{(0)}$, щоб проекція вектора $\vec{x}^{(0)}$ на гіперплощину $\left(A^T \vec{e}_j^{(0)}, \vec{\varepsilon}\right) = 0$, у напрямку вектора $\vec{e}_i^{(0)}$ мінімізувала норму вектора похибки $\vec{\varepsilon} = \vec{x} - \vec{x}^*$. Якщо цей процес повторити для всіх $k = 0,1,...$, то дістанемо алгоритм Гауса-Зейделя

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - \frac{\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)}\right)}{\left(A^T \vec{e}_j^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)}\right)} \vec{e}_i^{(k)} \tag{19}$$

і послідовність норм векторів похибок:

$$\left\|\vec{\varepsilon}^{(k+1)}\right\|_2^2 = K^{(k)} \left\|\vec{\varepsilon}^{(k)}\right\|_2^2, \; t_i^{(k)} = \cos\left\{\vec{\varepsilon}^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)}\right\} \tag{20}$$

$$K^{(k)} = 1 - 2\mu_{i,j}^{(k)} t_i^{(k)} + (\mu_{i,j}^{(k)})^2, \; \mu_{i,j}^{(k)} = \frac{\cos\left\{\vec{\varepsilon}^{(k)}, A^T \vec{e}_i^{(k)}\right\}}{\cos\left\{A^T \vec{e}_j^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)}\right\}},$$

де $\vec{e}_i^{(k)}, \vec{e}_j^{(k)}$ — одиничні вектори, що обираються на $(k+1)$-му кроці, $\vec{\varepsilon}^{(k)} = \vec{x}^{(k)} - \vec{x}^*$, $K^{(k)}$ — коефіцієнт збіжності.

Дослідимо на мінімум коефіцієнт збіжності $K^{(k)} = 1 - 2\tau\, t_i^{(k)} + \tau^2$ по параметру $\tau \in \mathbb{R}$, матимемо

$$0 < \min K^{(k)} = 1 - \tau_{\min}^2 < 1 \text{ за умови } \tau_{\min} = t_i^{(k)};$$

$$0 < K^{(k)} < 1 \text{ за умови } 0 < \tau < 2t_i^{(k)} \text{ або } 2t_i^{(k)} < \tau < 0. \tag{21}$$

Нерівності (21) визначають, як умови збіжності методу Гауса-Зейделя на k-му кроці, так і умови прискорення збіжності.

Умови збіжності (21) практично складно використовувати, оскільки вектор похибки $\vec{\varepsilon}^{(k)}$ невідомий, тому проаналізуємо норму вектора нев'язки:

$$\left\|\vec{r}^{(k+1)}\right\|_2^2 = C^{(k)} \left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2,$$

$$C^{(k)} = 1 - 2\frac{\cos\left\{\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)}\right\}}{\cos\left\{\vec{e}_j^{(k)}, A\vec{e}_i^{(k)}\right\}} \cos\left\{\vec{r}^{(k)}, A^T \vec{e}_i^{(k)}\right\} + \frac{\cos^2\left\{\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)}\right\}}{\cos^2\left\{\vec{e}_j^{(k)}, A\vec{e}_i^{(k)}\right\}}, \tag{22}$$

$$q_i^{(k)} = \cos\left\{\vec{r}^{(k)}, A^T \vec{e}_i^{(k)}\right\}, \; p_{i,j}^{(k)} = \cos\left\{\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)}\right\} \Big/ \cos\left\{\vec{e}_i^{(k)}, A\vec{e}_j^{\,(k)}\right\}.$$

Умова прискорення збіжності послідовності норм нев'язок, сформованих методом Гауса-Зейделя на k-му кроці, визначається нерівністю

$$0 < p_{i,j}^{(k)} \Big/ q_i^{(k)} < 2. \tag{23}$$

Метод мінімізації нев’язок і похибок у просторах AE **і** $A^T E$ **.** Процес Гауса-Зейделя, з однієї сторони, має просту реалізацію, оскільки використовує базис E одиничних векторів, з другої сторони, слабко збігається (або взагалі розбігається) для систем з довільними матрицями і, по-третє, умови вибору оптимальної пари векторів $\vec{e}_i^{(k)}, \vec{e}_j^{(k)}$ вимагають додаткових обчислень.

Розкладемо вектор похибки $\vec{\varepsilon} = \Delta\vec{x} = \vec{x}^{(0)} - \vec{x}^*$ по базису E :

$$\vec{x}^{(0)} - \vec{x}^* = \sum_{i=1}^{n} \tau_i \vec{e}_i \Rightarrow A\left(\vec{x}^{(0)} - \vec{x}^*\right) = A\sum_{i=1}^{n} \tau_i \vec{e}_i \Leftrightarrow \vec{r}^{(0)} = \sum_{i=1}^{n} \tau_i A\vec{e}_i, \tag{24}$$

дістанемо розклад вектора нев’зки. Якщо у розкладі (24) залишити окремі компоненти, то дістанемо сукупність векторів нев’язок $\vec{r}_i = \vec{r}^{(0)} - \tau_i A\vec{e}_i$. Виберемо параметри τ_i з умови найшвидшого зменшення норми вектора нев’язки, що еквівалентно розв’язуванню мінімаксної задачі: $\forall i \in [1:n]$,

$$\min_{\tau_i} \max_{i\in[1:n]} \left\|\vec{r}_i\right\|_2^2 = \min_{\tau_i}\left(\left\|\vec{r}^{(0)}\right\|_2^2 - 2\tau_i\left(\vec{r}^{(0)}, A\vec{e}_i\right) + \tau_i^2 \left\|A\vec{e}_i\right\|_2^2\right) \tag{25}$$

Алгоритм методу мінімальних нев’язок у просторі AE **.** До початку ітераційного процесу обчислити норми вектор-стовпців матриці $A : \left(\| A\vec{e}_i \|_2^2\right)_{i=1}^{n}$. Вибрати довільний вектор $\vec{x}^{(0)}$. Для всіх $k = 0,1,...$

- обчислити нев’язку $\vec{r}^{(k)} = A\vec{x}^{(k)} - \vec{b}$ та $A^T\vec{r}^{(k)}$;
- знайти індекс;

$$i_0 = \left\{ i : \max_{i\in[1:n]} \frac{\left(\vec{r}^{(0)}, A\vec{e}_i\right)^2}{\| A\vec{e}_i \|_2^2} = \max_{i\in[1:n]} \frac{\left(A^T\vec{r}^{(0)}, \vec{e}_i\right)^2}{\| A^T\vec{e}_i \|_2^2} \right. ;$$

- сформувати вектор

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - \frac{\left(\vec{r}^{(k)}, A\vec{e}_{i_0}\right)}{\left\|A\vec{e}_{i_0}\right\|_2^2} \vec{e}_{i_0} . \tag{26}$$

Продовжити процес до виконання умови $\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2 < \varepsilon_0$.

Лема 7. Послідовність норм нев’язок $\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2$ для $k \to \infty$ строго монотонно збігається до нуля для довільної матриці $A \in M_n\left(\mathbb{R}\right)$, ***rank*** $A = n$, і для довільного вектора $\vec{x}^{(0)}$.

Доведення. Для всіх $k = 1,2,3,...$ з формули (26) випливає, що якщо існують індекси $i_0^{(k)} \in [1:n]$, для яких $\left(\vec{r}^{(k)}, A\vec{e}_{i_0}\right) \neq 0$, то послідовність $\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2$ монотонно спадає. Якщо $\forall i \in [1:n]$ $\left(\vec{r}^{(k)}, A\vec{e}_i\right) = 0$, то $\vec{r}^{(k)} = \vec{0}$, оскільки система векторів $\left\{A\vec{e}_i\right\}_{i=1}^{n}$ лінійно незалежна. Доведення леми 7 завершене.

Якщо у розкладі (24) залишити p компонент $\left(i_1,...,i_p\right) \in I_p$, $\left(A^T\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i\right) \neq 0$, $i \in I_p$, то дістанемо задачу:

$$\min_{\tau}\max_{i\in I_p}\left\|\vec{r}_p\right\|_2^2 = \min_{\tau}\max_{i\in I_p}\left(\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|_2^2 - 2\sum_{i\in I_p}\tau_i\left(\vec{r}^{(k)}, A\vec{e}_i\right) + \sum_{i\in I_p}\sum_{j\in I_p}\tau_i\tau_j\left(A\vec{e}_i, A\vec{e}_j\right)\right).$$

Для фіксованої множини індексів I_p задача зведеться до розв'язання системи рівнянь відносно вектора $\vec{\tau} = \left(\tau_{i_1},...,\tau_{i_p}\right)^T$ з симетричною додатно визначеною матрицею B і вектором правих частин $\vec{f}$: $B\vec{\tau} = \vec{f}$,

$$B = \left[\left(A\vec{e}_i, A\vec{e}_j\right)\right]_{i,j\in I_p}, \quad \vec{f} = \left[\left(\vec{r}^{(k)}, A\vec{e}_i\right)\right]_{i\in I_p}^T. \tag{27}$$

Знову розкладемо вектор похибки $\vec{\varepsilon}^{(0)} = \vec{x}^{(0)} - \vec{x}^*$, але по базису $\left\{A^T\vec{e}_i\right\}_{i=1}^{n}$, матимемо

$$\vec{\varepsilon}^{(0)} = \vec{x}^{(0)} - \vec{x}^* = \sum_{i=1}^{n}\nu_i A^T\vec{e}_i. \tag{28}$$

Якщо у розкладі (28) залишити окремі доданки, то дістанемо вектори похибок $\vec{\varepsilon}_i = \vec{\varepsilon}^{(0)} - \nu_i A^T\vec{e}_i$. Знайдемо параметри ν_i з умови найшвидшого зменшення норми вектора похибки:

$$\min_{\nu_i}\max_{i\in[1:n]}\left\|\vec{\varepsilon}_i\right\|_2^2 = \min_{\nu_i}\max_{i\in[1:n]}\left(\left\|\vec{\varepsilon}^{(0)}\right\|_2^2 - 2\nu_i\left(\vec{r}^{(0)}, \vec{e}_i\right) + \nu_i^2\left\|A^T\vec{e}_i\right\|_2^2\right). \tag{29}$$

Алгоритм методу мінімальних похибок у просторі A^TE. До початку ітераційного процесу обчислити $\left(\left\|A^T\vec{e}_i\right\|_2^2\right)_{i=1}^{n}$. Вибрати довільний вектор $\vec{x}^{(0)}$. Для всіх $k = 0,1,...$

- обчислити нев’язку $\vec{r}^{(k)} = A\vec{x}^{(k)} - \vec{b}$;
- знайти індекс $i_0 = \left\{ i : \max\limits_{i\in[1:n]} \left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i \right)^2 \Big/ \left\| A^T \vec{e}_i \right\|_2^2 \right\}$;
- сформувати вектор

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - \frac{\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_{i_0} \right)}{\left\| A^T \vec{e}_{i_0} \right\|_2^2} A^T \vec{e}_{i_0} . \tag{30}$$

Продовжити процес до виконання умови $\left\| \vec{r}^{(k)} \right\|_2 < \varepsilon_0$.

Лема 8. Послідовність норм похибок $\left\| \vec{\varepsilon}^{(k)} \right\|_2$ для $k \to \infty$ строго монотонно збігається до нуля для довільної матриці $A \in M_n(R)$, ***rank*** $A = n$, і для довільного вектора $\vec{x}^{(0)}$.

Доведення леми 8 проводиться аналогічно доведенню леми 7.

Якщо у розкладі (28) залишити p компонент $\left(i_1,...,i_p\right) \in J_p$, для яких $\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i\right) \neq 0$, $i \in J_p$, то, аналогічно (27), задача зведеться до знаходження вектора $\vec{v} = \left(v_{i_1},...,v_{i_p}\right)^T$, шляхом розв’язання системи рівнянь

$$C\vec{v} = \vec{d}\ ,\ C = \left[\left(A^T\vec{e}_i, A^T\vec{e}_j \right) \right]_{i,j\in J_p} ,\ \vec{d} = \left[\left(\vec{r}^{(k)}, \vec{e}_i \right) \right]_{i\in J_p}^T , \tag{31}$$

з симетричною додатно визначеною матрицею C.

Якщо для систем індексів $i \in I_p$, або $i \in J_p$ відповідно вектори $\left\{ A\vec{e}_i \right\}_{i\in I_p}$ або $\left\{ A^T\vec{e}_i \right\}_{i\in J_p}$ взаємно ортогональні, то матриці B або C стануть діагональними. Якщо, крім того, матриця A симетрична, то $B = C$, але $\vec{f} \neq \vec{d}$.

Теорема. Послідовність норм векторів нев’язок, обчислених методом мінімальних нев’язок (26) у просторі AE збігається швидше, ніж послідовність норм векторів нев’язок, обчислених методом Гауса-Зейделя (22) у просторі E.

Якщо на k-му кроці існує одиничний вектор $\vec{e}_i^{(k)}$ такий, що $\left| \cos\left\{ \vec{e}^{(k)}, \vec{e}_i^{(k)} \right\} \right| > \left| \cos\left\{ \vec{e}_i^{(k)}, A^T\vec{e}_i^{(k)} \right\} \right|$, $\forall j \in [1:n]$, то доцільно для мінімізації норми вектора похибок використовувати метод Гаусса-Зейделя (20), у протилежному випадку, – метод мінімальних похибок (30). Такий процес прискорить швидкість збіжності методу Гаусса-Зейделя для розв’язання системи $A\vec{x} = \vec{b}$ з довільними невиродженими матрицями $A \in M_n(R)$, $\boldsymbol{rank}\, A = n$.

Доведення теореми засновано на дослідженні коефіцієнта збіжності.

Результати

1. Досліджено умови, що прискорюють швидкість збіжності методів мінімальних похибок, мінімальних нев’язок, найшвидшого зменшення нев’язки, найшвидшого спуску Гауса-Зейделя.
2. Досліджено, як впливає розподіл власних значень та обумовленість матриці переходу на швидкість збіжності ітераційних методів. Описані області $\Omega_{\min}, \Omega_{\max}$.
3. Запропонована модифікація алгоритму мінімальних похибок (мінімальних нев’язок) з керуванням швидкістю процесу збіжності.
4. Показана залежність процесу збіжності ітераційних методів від вибору вектора початкового наближення.
5. Для сіткових рівнянь запропоновані методи мінімальних похибок та нев’язок у просторах $A^T E$, AE, які прискорюють швидкість збіжності ітерацій Гауса-Зейделя.

Список використаних джерел:

1. Абрамчук В. С. О перспективности методов направленного поиска решения систем $Ax = f$ с плохо обусловленными матрицами / В. С. Абрамчук // Доп. НАН Украины. Сер. Б. — 1995. — № 2. — С. 5–7.
2. Абрамчук В. С. Ефективні ітераційні методи розв’язування систем лінійних рівнянь / В. С. Абрамчук, І. В. Абрамчук, А. Вешемірський // Вісник Львівського університету. Сер. Прикладна математика та інформатика. — 2007. — Вип. 12. — С. 5–12.
3. Абрамчук В. С. Обоснование эффективности методов направленного поиска / В. С. Абрамчук // Доп. НАН України. — 1997. — № 11. — С. 7–12.
4. Абрамчук В. С. Ітераційні методи розв’язування систем лінійних рівнянь з довільними невиродженими матрицями / В. С. Абрамчук, І. В. Абрамчук // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: зб. наук. праць. — Кам’янець-Подільський : Кам’янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2012. — Вип. 6. — С. 3–16.
5. Воеводин В. В. Матрицы и вычисления / В. В. Воеводин, Ю. А Кузнецов. — М. : Наука, 1984. — 320 с.
6. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра / Дж. Деммель. — М. : Мир, 2001. — 429 с.
7. Зверев В. Г. Модифицированный полилинейный метод решения разностных эллиптических уравнений / В. Г. Зверев // ЖВМ и МФ. — 1998. — Т. 38. — № 9. — С. 1553–1562.

8. Ильин В. П. Методы бисопряженных направлений в подпространствах Крылова / В. П. Ильин // Сибирский журнал индустриальной математики. — 2008. — Т. XI. — № 4 (36). — С. 47–60.
9. Ланкастер К. Математическая экономика. / К. Ланкастер ; под ред. Д. Б. Юдина. — М. : Советское радио, 1972. — 464 с.
10. Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем / Дж. Ортега. — М. : Мир, 1991. — 364 с.
11. Тыртышников Е. Е. Методы численного анализа: Курс лекций / Е. Е. Тыртышников. — М. : ИВМ РАН, 2006. — 291 с.
12. Тыртышников Е. Е. Матричный анализ и линейная алгебра / Е.Е. Тыртышников. — М. : Физматлит, 2007. — 480 с.
13. Фомин А. А. Сравнение эффективности высокоскоростных методов решения разностных эллиптических СЛАУ / А. А. Фомин, Л. Н. Фомина // Вестник Томского университета. Сер. Математика и механика. — 2009. — № 2. — С. 71–77.
14. Хейгеман Л. Прикладные итерационные методы / Л. Хейгеман, Д. Янг ; пер. с англ. — М. : Мир, 1986. — 448 с.
15. Хорн Р. Матричный анализ / Р. Хорн, Ч. Джонсон. — М. : Мир, 1989. — 655 с.
16. Yousef Saad. Iterative Methods for Sparse Linear Systems / Saad Yousef. — N.Y. : PWS Publ., 1996. — 460 p.

Both the conditions account for the slowing of convergence rate of iterative methods of $A\vec{x} = \vec{b}$ systems solving and the conditions allowing accelerate the convergence of iteration process are investigated.

Key words: *minimal error method, Minimal Residual method— MinRES, Residual norm Steepest Descent — RnSD, Steepest Descent Method — SDM, Gauss-Seidel method.*

Отримано: 25.02.2013