Метод исключения Гаусса

$$\left.\begin{array}{ccccc} a_{11}\,x_1 + a_{12}\,x_2 + & \dots & +a_{1n}\,x_n & = & b_1 \\ a_{21}\,x_1 + a_{22}\,x_2 + & \dots & +a_{2n}\,x_n & = & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}\,x_1 + a_{n2}\,x_2 + & \dots & +a_{nn}\,x_n & = & b_n \end{array}\right\} \tag{1}$$

Из первого уравнения выражаем x_1

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}}\,(b_1 - a_{12}\,x_2 - \dots - a_{1n}\,x_n). \tag{2}$$

Затем, умножая вторую строку на a_{11}, а первую на a_{21} и вычитая, исключаем из второй строки x_1:

$$(a_{22}\,a_{11} - a_{12}\,a_{21})x_2 + (a_{23}\,a_{11} - a_{13}\,a_{21})x_3 + \cdots = (a_{11}\,b_2 - a_{21}\,b_1),$$

и проделывая то же самое со следующими строками, получаем систему $n-1$ уравнений с $n-1$ переменными:

$$\left.\begin{array}{ccccc} a_{22}^{(1)}\,x_2 + a_{23}^{(1)}\,x_3 + & \ldots & +a_{2n}^{(1)}\,x_n & = & b_2^{(1)} \\ a_{32}^{(1)}\,x_2 + a_{33}^{(1)}\,x_3 + & \ldots & +a_{3n}^{(1)}\,x_n & = & b_3^{(1)} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ a_{n2}^{(1)}\,x_2 + a_{n3}^{(1)}\,x_3 + & \ldots & +a_{nn}^{(1)}\,x_n & = & b_n^{(1)} \end{array}\right\}, \qquad (3)$$

где

$$a_{ij}^{(1)} = a_{11}\,a_{ij} - a_{i1}\,a_{1j}; \quad b_i^{(1)} = a_{11}\,b^i - a_{i1}\,b_1. \qquad (4)$$

Теперь все можно повторять сначала, исключая уже x_2. Получилась *рекурсивная схема*. Исключив x_1, x_2 $\ldots$, x_{k-1} получаем систему из $n-k+1$ уравнений с $n-k+1$ переменными:

$$\left.\begin{array}{ccccc}
a_{kk}^{(k-1)}\,x_k + a_{k\,k+1}^{(k-1)}\,x_{k+1}+ & \ldots & +a_{kn}^{(k-1)}\,x_n & = & b_k^{(k-1)} \\
a_{k+1\,k}^{(k-1)}\,x_k + a_{k+1\,k+1}^{(k-1)}\,x_{k+1}+ & \ldots & +a_{k+1\,n}^{(k-1)}\,x_n & = & b_{k+1}^{(k-1)} \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\
a_{nk}^{(k-1)}\,x_k + a_{n\,k+1}^{(k-1)}\,x_{k+1}+ & \ldots & +a_{nn}^{(k-1)}\,x_n & = & b_n^{(k-1)}
\end{array}\right\}, \tag{5}$$

где

$$a_{ij}^{(k)} = a_{kk}^{(k-1)}\,a_{ij}^{(k-1)} - a_{i\,k}^{(k-1)}\,a_{kj}^{(k-1)};$$

$$b_i^{(k)} = a_{k\,k}^{(k-1)}\,b_i^{(k-1)} - a_{ik}^{(k-1)}\,b_k^{(k-1)}; \quad i,j \geq k. \tag{6}$$

При этом

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}}\,(b_k^{(k-1)} - a_{k\,k+1}^{(k-1)}\,x_{k+1} - \cdots - a_{kn}^{(k-1)}\,x_n). \tag{7}$$

Компактная схема исключения

Матрица (1) приводится к верхней диагональной

$$\left.\begin{array}{rcc} x_1 + \alpha_{12}\,x_2 + \alpha_{13}\,x_3 + \cdots + \alpha_{1n}\,x_n & = & \beta_1 \\ x_2 + \alpha_{23}\,x_3 + \cdots + \alpha_{2n}\,x_n & & \beta_2 \\ \ldots\ \ldots & \ldots & \ldots \\ x_n & = & \beta_n \end{array}\right\} \qquad (8)$$

и из полученной системы находятся $x_n, x_{n-1}, \ldots, x_2, x_1$. Коэффициенты α, β, а также промежуточные коэффициенты γ образуют $(n+1) \times n$ матрицу:

$$\begin{array}{ccccc} \gamma_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \ldots & \alpha_{1n} & \beta_1 \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \alpha_{23} \ldots & \alpha_{2n} & \beta_2 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots\ldots & \ldots \\ \gamma_{n1} & \gamma_{n2} & \gamma_{n3} \ldots & \gamma_{nn} & \beta_n \end{array}$$

$$\gamma_{i1} = a_{i1} \quad (i = 1,\, 2, \ldots,\, n); \quad \alpha_{1k} = \frac{a_{1k}}{a_{11}} \quad (k = 2, 3, \ldots,\, n);$$

$$\gamma_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} \gamma_{ij}\, \alpha_{jk} \quad (i,\, k = 2,\, 3,\, \ldots,\, n;\; i > k);$$

$$\alpha_{ik} = \frac{1}{\gamma_{ii}} \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} \gamma_{ij}\, \alpha_{jk} \right) \quad (i,\, k = 2,\, 3,\, \ldots,\, n;\; i < k);$$

$$\beta_1 = \frac{b_1}{a_{11}}; \quad \beta_i = \frac{1}{\gamma_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{k-1} \gamma_{ij}\, \beta_j \right) \quad (i = 2,\, 3,\, \ldots,\, n).$$

Клеточное разбиение

$$(A^{(m+k\, m+k)}) = \begin{pmatrix} (A_{11}^{(mm)}) & (A_{12}^{(mk)}) \\ (A_{21}^{(km)}) & (A_{22}^{(kk)}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} X_1^{(m)} \\ X_2^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1^{(m)} \\ B_2^{(k)} \end{pmatrix}.$$

$$(A_{11}^{(mm)})\, X_1^{(m)} + (A_{12}^{(mk)})\, X_2^{(k)} = B_1^{(m)};$$

$$(A_{21}^{(km)})\, X_1^{(m)} + (A_{22}^{(kk)})\, X_2^{(k)} = B_2^{(k)};$$

Умножив первую систему слева на обратную матрицу A_{11}, выражаем столбец X_1:

$$X_1 = A_{11}^{-1}(B_1 - A_{12}\, X_2);$$

$$(A)^{-1} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix};$$

$$C_{11} = (A_{11} - A_{12}\, A_{22}^{-1}\, A_{21})^{-1}; \quad C_{21} = -A_{22}^{-1}\, A_{21}\, C_{11}; \tag{9}$$

$$C_{22} = (A_{22} - A_{21}\, A_{11}^{-1}\, A_{12})^{-1}; \quad C_{12} = -A_{11}^{-1} A_{12}\, C_{22}.$$

Метод окаймления

Предыдущий метод при $m = n-1$, $k = 1$. Введем матрицу a_{ij}^{-1}, обратную подматрице a_{jk} размерности $(n-1)\times(n-1)$ – на единицу меньшей, чем у матрицы a_ij:

$$\sum_{j=1}^{n-1} a_{kj}^{-1}\, a_{jl} = \delta_{kl} = \begin{cases} 1 & (k = l) \\ 0 & (k \neq l) \end{cases} \quad ; \qquad k,\, l < n.$$

Из дополнительной строки матрицы a_{ni} и столбца a_{jn} $(i,\, j < n)$ образуем новые столбец и строку

$$c_k = \sum_{j=1}^{n-1} a_{kj}^{-1}\, a_{jn}; \quad d_k = \sum_{j=1}^{n-1} a_{nj}\, a_{jk}^{-1}; \quad D = a_{nn} - \sum_{j=1}^{n-1} a_{nk}\, c_k = a_{nn} - \sum_{k=1}^{n-1} d_k$$

Тогда элементы обратной $n \times n$ матрицы выразятся через элементы обратной $(n-1)\times(n-1)$ матрицы и дополнительные элементы a_{in}, a_{nn}, a_{nj}:

$$\tilde{a}_{si}^{-1} = a_{si}^{-1} + \frac{c_s\, d_i}{D}; \quad \tilde{a}_{sn}^{-1} = -\frac{c_s}{D}; \quad \tilde{a}_{ns}^{-1} = -\frac{d_s}{D}; \quad \tilde{a}_{nn}^{-1} = \frac{1}{D}. \quad (10)$$

Обращение матрицы 2x2

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}.$$

$$a_{11}^{-1} = \frac{1}{a_{11}}; \quad c_1 = \frac{a_{12}}{a_{11}}; \quad d_1 = \frac{a_{21}}{a_{11}}; \quad D = a_{22} - \frac{a_{21}\, a_{12}}{a_{11}}.$$

Теперь по формулам (10) вычислим обратную матрицу

$$\tilde{a}_{11}^{-1} = a_{11}^{-1} + \frac{c_1\, d_1}{D} = \frac{1}{a_{11}} + \frac{a_{12}\, a_{21}}{a_{11}^2 \left(a_{22} - \frac{a_{21}\, a_{12}}{a_{11}}\right)} = \frac{a_{22}}{a_{11}\, a_{22} - a_{21}\, a_{12}}.$$

$$\tilde{a}_{12}^{-1} = -\frac{c_1}{D} = \frac{-a_{12}}{a_{11}\, a_{22} - a_{21}\, a_{12}}; \quad \tilde{a}_{21}^{-1} = -\frac{d_1}{D} = \frac{-a_{21}}{a_{11}\, a_{22} - a_{21}\, a_{12}};$$

$$\tilde{a}_{22}^{-1} = \frac{1}{D} = \frac{a_{11}}{a_{11}\, a_{22} - a_{21}\, a_{12}}.$$

Этот метод можно применять рекурсивно. Если теперь эта матрица 2×2 является подматрицей матрицы 3×3, то теперь, имея обратную 2×2 матрицу, по тому же алгоритму можно вычислить обратную матрицу 3×3 и т. д.

Итерационные методы

Условия экстремума (минимума) квадратичной функции

$$f = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} a_{ij}\, x_i\, x_j - \sum_{i=1}^{n} b_i\, x_i; \quad \frac{\partial f}{\partial x_i} = 0 \tag{11}$$

приводит к системе линейных уравнений (**??**).
Итерационный поиск минимума

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} + \lambda^{(j)}\, v_i^{(j)} \quad (i = 1,\, 2,\, \ldots,\, n;\; j = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots)\,, \tag{12}$$

Простая итерация

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} - \lambda^{(j)} \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k^{(j)} - b_i \right) \quad (i = 1, 2, \ldots, n;\ j = 0, 1, 2,$$

Метод Зайделя

Уже найденные новые координаты сразу используются для нахождения последующих.

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} - \frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{k=1}^{i-1} a_{ik}\, x_k^{(j+1)} + \sum_{k=i}^{n} a_{ik}\, x_k^{(j)} - b_i \right)$$

$$(i = 1,\, 2,\, \ldots,\, n;\; j = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots)\,.$$

Метод координатной релаксации

На каждом шаге уничтожается наибольшая по абсолютной величине невязка $f_i^{(j)}$ путем исправления только одного x_i:

$$x_i^{(j+1)} = x_i^{(j)} - \frac{f_i^{(j)}}{a_{ii}}; \quad f_i^{(j)} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}\, x_k^{(j)} - b_i;$$

$$x_k^{(j+1)} = x_k^{(j)}\; k \neq i.$$

Проекционный метод (алгоритм Качмаржа)

Каждое уравнение системы $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x^j - b_i = 0$ – это уравнение $(n-1)$ - мерной гиперплоскости в n - мерном пространстве.
Например,
$a_{i1}x + a_{i2}y - b_i = 0$ – уравнение прямой на плоскости
$a_{i1}x + a_{i2}y + a_{i3}z - b_i = 0$ – уравнение плоскости.
Пересечение n не совпадающих гиперплоскостей и есть точка – решение.
Коэффициенты a_{ij} пропорциональны нормали к i - й гиперповерхности, а
$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x^j$ – проекция вектора с координатами x^j на нормаль.

Из исходной точки производится сдвиг по нормали к одной из гиперповерхностей до пересечения с ней. Затем из этой точки – сдвиг по нормали ко второй гиперповерхности до пересечения с ней и т. д., пока не будет достигнута желаемая точность.
Сдвиг по нормали к i - й гиперповерхности:

$$\bar{x}^j = x^j + t\, a_{ij}$$

Параметр t нужно выбрать так, чтобы i - е уравнение выполнилось точно:

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij}\bar{x}^j - b_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x^j + t\sum_{j=1}^{n}(a_{ij})^2 - b_i = 0.$$

Отсюда

$$t = \frac{b_i - \sum_{s=1}^{n} a_{is}x^s}{\sum_{s=1}^{n}(a_{is})^2},$$

где x^j – координаты исходной точки. Теперь, вычислив t, находим следующую точку. Она точно лежит на i - й гиперповерхности, но не на других:

$$\bar{x}^j = x^j + \frac{b_i - \sum_{s=1}^{n} a_{is}x^s}{\sum_{s=1}^{n}(a_{is})^2}\, a_{ij}.$$