Iteračné metódy riešenia lineárnych sústav

Ing. Gabriel Okša, CSc.

Matematický ústav
Slovenská akadémia vied
Bratislava

Stavebná fakulta STU

Obsah

Všeobecný algoritmus

- Úloha: nájsť riešenie sústavy lineárnych rovníc:

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{C}^{n\times n}, \quad x,\ b \in \mathbb{C}^{n\times 1}$$

- Všeobecný algoritmus iteračnej metódy:
  1. Zvoľ počiatočnú aproximáciu $x_0 \in \mathbb{C}^{n\times 1}$.
  2. Pre $k = 0, 1, 2, \ldots$ opakuj až po konvergenciu:

$$x_{k+1} = S_k x_k + V_k b,$$

     kde matice S_k a V_k závisia od iteračnej metódy a môžu závisieť od iteračného kroku k.

- Reziduálny vektor: $r_k \equiv b - Ax_k$. Iteračná metóda skonvergovala v k-tom kroku, ak:

$$\|r_k\| \leq \texttt{tol},\ 0 < \texttt{tol} \ll 1,$$

kde `tol` je daná konštanta.

$$x_{k+1} = S_k x_k + V_k b$$

- Základný rozklad matice A:

$$A = L + D + U,$$

kde D je diagonála A, L je dolný trojuholník matice A (bez diagonály) a U je horný trojuholník matice A (bez diagonály).

- Iný typ rozkladu (tzv. 'splitting'):

$$A = M - N, \quad \text{napr.} \quad M = D,\ N = -(L + U).$$

Základné metódy

Základné iteračné metódy:

1. Jacobiho metóda: $S_{\mathrm{J}} = -D^{-1}(L+U),\; V_{\mathrm{J}} = D^{-1}$.
2. Gaussova-Seidelova metóda:
   $S_{\mathrm{GS}} = -(D+L)^{-1}U,\; V_{\mathrm{GS}} = (D+L)^{-1}$.
3. Metóda SOR ('Successive Over Relaxation'):
   $S_{\mathrm{SOR}} = (D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D - \omega U],\; V_{\mathrm{SOR}} = \omega(D+\omega L)^{-1}$,
   kde ω je reálna konštanta (tzv. relaxačný parameter).

Rozklad: $A = M - N$

- Jacobiho a Gaussova-Seidelova metóda sa dajú vyjadriť v tvare:

$$Mx_{k+1} = Nx_k + b, \quad \text{kde } A = M - N.$$

- Metóda SOR súvisí so špeciálnym rozkladom:

$$\omega A = (D + \omega L) + [\omega U - (1 - \omega) D].$$

Jacobi po zložkách

- Nech $x_k = (\mu_1^{(k)}, \mu_2^{(k)}, \dots, \mu_n^{(k)})$ and $b = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n)$.
- Jacobiho metóda: vypočíta i-tu zložku novej iterácie tak, že vynuluje i-tu zložku nového rezídua:

$$(b - Ax_{k+1})_i = 0 \Longleftrightarrow a_{ii}\mu_i^{(k+1)} + \sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} a_{ij}\mu_j^{(k)} = \beta_i,$$

a teda:

$$\mu_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}}\left(\beta_i - \sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} a_{ij}\mu_j^{(k)}\right),\ i = 1, 2, \dots, n.$$

V maticovom zápise:

$$x_{k+1} = -D^{-1}(L+U)x_k + D^{-1}b.$$

Gauss-Seidel po zložkách

- Gaussova-Seidelova metóda: tiež vypočíta i-tu zložku novej iterácie tak, že vynuluje i-tu zložku nového rezídua v poradí $i = 1, 2, \ldots, n$, ale tentokrát sa *zložky novej iterácie použijú ihneď potom, ako sú vypočítané*:

$$\beta_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\mu_j^{(k+1)} - a_{ii}\mu_i^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\mu_j^{(k)} = 0,$$

a teda (pre $i = 1, 2, \ldots, n$):

$$\mu_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(\beta_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}\mu_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\mu_j^{(k)} \right). \qquad (1)$$

V maticovom zápise: $b - Lx_{k+1} - Dx_{k+1} - Ux_k = 0$,
a teda:

$$x_{k+1} = -(L + D)^{-1} Ux_k + (L + D)^{-1} b.$$

SOR po zložkách

- Metóda SOR je založená na rozklade:

$$\omega A = (D + \omega L) + [\omega U - (1 - \omega) D].$$

- Rekurzia SOR:

$$(D + \omega L) x_{k+1} = [(1 - \omega) D - \omega U] x_k + \omega b.$$

- Po zložkách:

$$\mu_i^{(k+1)} = \omega \mu_i^{\mathrm{GS}} + (1 - \omega) \mu_i^{(k)}, \ i = 1, 2, \ldots, n,$$

kde μ_i^{GS} je pravá strana rovnice (1).

SOR je teda *korigovaný Gauss-Seidel* (pre $\omega = 1$ obe metódy splývajú).

Konvergencia

- Základné otázky:
  1. Ak iterácie konvergujú, je limita riešením SLR?
  2. Za akých podmienok iterácie konvergujú?
  3. Ak iterácie konvergujú, ako rýchlo?
- Všeobecný iteračný proces (VIP): $x_{k+1} = Gx_k + f$.
  Ak konverguje, potom v limite $k \to \infty$ platí:
  $x_\star = Gx_\star + f$, t.j., $(I - G)x_\star = f$.
  Takže pre *chybu* riešenia v $(k+1)$. kroku platí:
  $x_{k+1} - x_\star = G(x_k - x_\star) = G^2(x_{k-1} - x_\star) = \dots$
  $= G^{k+1}(x_0 - x_\star)$.

  Veta 8.1 Nech $\rho(G)$ je spektrálny polomer matice G a nech $\rho(G) < 1$. Potom $(I - G)$ je regulárna a VIP konverguje pre ľubovoľný počiatočný vektor x_0. A naopak: ak VIP konverguje pre ľubovoľné x_0, potom $\rho(G) < 1$. $\square$

Rozklad $A = M - N$

- Ak $A = M - N$, potom VIP má tvar:

  $x_{k+1} = M^{-1}Nx_k + M^{-1}b$, t.j. $G = M^{-1}N$ a $f = M^{-1}b$.
- Ak tento proces konverguje, potom:

  $x_\star = M^{-1}Nx_\star + M^{-1}b$, čo je ekvivalentné k:

  $(M - N)x_\star = b$, t.j. $x_\star$ je riešením SLR $Ax = b$.
- Rýchlosť konvergencie: meria sa veličinou
  $\phi = -\ln \rho(G) = -\ln \rho(M^{-1}N)$.

Jacobi a Gauss-Seidel

- Definícia 8.2 Matica A rádu n je *diagonálne silne dominantná* (SDD), ak

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} |a_{ij}|, \; i = 1, 2, \ldots, n.$$

- Veta 8.3 Ak je matica A SDD, potom Jacobiho i Gaussova-Seidelova metóda konvergujú pre ľubovoľný počiatočný vektor x_0, pričom Gaussova-Seidelova metóda konverguje rýchlejšie. $\square$
- Veta 8.4 Ak je matica A symetrická a pozitívne definitná (SPD) (t.j. $A = A^T$ a $x^T Ax > 0$ pre všetky $x \neq 0$), potom Gaussova-Seidelova metóda konverguje pre ľubovoľný počiatočný vektor x_0. $\square$

SOR $=$ korigovaný Gauss-Seidel

- Veta 8.5 (Kahan) Metóda SOR nemôže konvergovať pre ľubovoľný počiatočný vektor x_0, ak ω leží zvonka intervalu $(0, 2)$. $\square$
- Veta 8.6 (Ostrowski-Reich) Nech matica A je SPD a nech $0 < \omega < 2$. Potom metóda SOR konverguje pre ľubovoľný počiatočný vektor x_0. $\square$

Výber parametra ω

- Doteraz nie je známa metóda pre výber optimálnej hodnoty ω pre ľubovoľnú maticu A. Ale takéto kritérium je známe pre dôležitú triedu matíc.
- Definícia 8.7 Matica $A = L + D + U$ je *konzistentne usporiadaná*, ak vlastné čísla matice

$$C(\mu) = -D^{-1}(\frac{1}{\mu}L + \mu U)$$

nezávisia od reálneho parametra $\mu \neq 0$.

2-cyklické matice

- Definícia 8.8 Matica A je *2-cyklická*, ak existuje permutačná matica P taká, že

$$PAP^T = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix},$$

kde A_{11} a A_{22} sú diagonálne matice.
Ak A_{11} a A_{22} sú blokovo diagonálne, A sa nazýva *blokovo 2-cyklická*.

Optimálna hodnota parametra ω

- Veta 8.9 (Young) Nech A je konzistentne usporiadaná a 2-cyklická matica s nenulovými diagonálnymi prvkami. Potom
$$\rho(S_{\mathrm{GS}}) = \rho(S_{\mathrm{J}})^2.$$
Ak sú vlastné čísla matice S_{J} reálne a $\rho(S_{\mathrm{J}}) < 1$, potom optimálna hodnota ω_{opt}, ktorá zaručuje najmenší spektrálny polomer pre metódu SOR, je daná vzťahom
$$\omega_{\mathrm{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(S_{\mathrm{J}})^2}}\,,$$
pričom $\rho(S_{\mathrm{SOR}}) = \omega_{\mathrm{opt}} - 1$. $\square$

Porovnanie konvergencie: GS vs. SOR

- Veta 8.10 (Young) Nech A je konzistentne usporiadaná matica s nenulovými diagonálnymi prvkami. Nech sú všetky vlastné čísla matice S_{J} Jacobiho iteračnej metódy reálne a nech $\rho(S_{\mathrm{J}}) < 1$. Nech R_{GS} a R_{SOR} značia asymptotické rýchlosti konvergencie metódy GS a SOR s optimálnou hodnotou relaxačného parametra ω_{opt}. Potom

$$2\,\rho(S_{\mathrm{J}})\,R_{\mathrm{GS}}^{1/2} \leq R_{\mathrm{SOR}} \leq R_{\mathrm{GS}} + 2\,R_{\mathrm{GS}}^{1/2}\,,$$

  pričom nerovnosť vpravo platí, ak $R_{\mathrm{GS}} \leq 3$. $\square$

Príklad: Blokovo trojdiagonálna matica

- Dvojrozmerná Poissonova PDR na $\Omega = (0,1) \times (0,1)$ s okrajovými podmienkami:
$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x,y),\ u(x,y) = g(x,y) \text{ na } \partial\Omega.$$
- Diskretizácia na sieti s krokom $h = 1/(n+1)$ v oboch smeroch vedie na LS s maticou sústavy A rádu n^2, ktorá je blokovo trojdiag., sym. a diag. dom.:
$$A = \begin{pmatrix} B_n & -I_n & 0 & \cdots & 0 \\ -I_n & B_n & -I_n & \cdots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & -I_n \\ 0 & 0 & 0 & -I_n & B_n \end{pmatrix},$$
kde $B_n = \mathrm{tridiag}(-1, 4, -1)$ je rádu n a SPD.

Príklad: Blokovo trojdiagonálna matica

- Dôležité: Každá blokovo trojdiagonálna matica s nesingulárnymi diagonálnymi blokmi je konzistentne usporiadaná a 2-cyklická.
- Jacobiho metóda: $\rho(S_{\mathrm{J}}) = \cos(\pi h)$ a $\rho(S_{\mathrm{GS}}) = \rho(S_{\mathrm{J}})^2$, takže:

$$R_{\mathrm{GS}} = -2 \ln[\cos(\pi h)] = 2\frac{\pi^2 h^2}{2} + O(h^4) = \pi^2 h^2 + O(h^4).$$

Ak je h malé, R_{GS} je malé a (Veta 8.10) dáva

$$R_{\mathrm{SOR}} \approx 2 R_{\mathrm{GS}}^{1/2} = 2\pi h,$$

takže $R_{\mathrm{SOR}}/R_{\mathrm{GS}} \approx 2/(\pi h)$.

Programové vybavenie

- Adresár: `datta_CPP`.
- Moduly:
  1. `MyLinearAlgebra.h` - projekty funkcií;
  2. `MyJacobi.cpp` - Jacobiho metóda;
  3. `MyGaussSeidel.cpp` - Gaussova-Seidelova metóda;
  4. `MySOR.cpp` - metóda SOR;
  5. `MyPoisson2DMatrix.cpp` - generovanie blokovo trojdiagonálnej matice, ktorá vznikne diskretizáciou Poissonovej PDR na štvorci $[0,1] \times [0,1]$;
  6. `MyTestIterativeLinSys.cpp` - interfejs na testovanie horeuvedených iteračných metód;
- Preklad: `g++ -c modul.cpp`   Výstup: `modul.o`
- Linkovanie:

  ```
  g++ -o meno modul1.o modul2.o ...  -lm
  ```

  Výstup: `meno`