MATEMATIKA 3

Dana Černá

http://kmd.fp.tul.cz

Katedra matematiky a didaktiky matematiky

Technická univerzita v Liberci

ITERAČNÍ METODY:

Maticové iterační metody:

- Jacobiho
- Gaussova-Seidelova
- Superrelaxační metoda

Gradientní iterační metody:

- Metoda sdružených gradientů

MATICOVÉ ITERAČNÍ METODY:

ODVOZENÍ: Soustavu

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

upravíme do tvaru

$$\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{c}$$

a definujeme posloupnost vektorů

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{i} + \mathbf{c},$$

kde $\mathbf{x}^0$ je zvolený počáteční vektor.

Konstruujeme posloupnost vektorů danou předpisem:
$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{i} + \mathbf{c}, \quad i = 0, 1, \dots,$
kde $\mathbf{x}^0$ je zvolený počáteční vektor. Matice $\mathbf{B}$ a vektor $\mathbf{c}$ jsou zvoleny tak, že pro přesné řešení x^* původní soustavy platí
$\mathbf{x}^* = \mathbf{B}\mathbf{x}^* + \mathbf{c}$.

VĚTA: Nutná a postačující podmínka konvergence
Posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ právě tehdy, když $\rho(\mathbf{B}) < 1$.

VĚTA: Postačující podmínka konvergence
Posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, pokud pro některou maticovou normu $\|\ \|$ platí $\|\mathbf{B}\| < 1$.

1. JACOBIHO METODA

Rozložme matici $\mathbf{A}$:
$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$,
kde $\mathbf{D}$ je diagonální matice, $\mathbf{L}$ je dolní trojúhelníková matice s nulami na diagonále a $\mathbf{U}$ je horní trojúhelníková matice s nulami na diagonále. Platí

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{D}\mathbf{x} + (\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{D}\mathbf{x} = -\,(\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x} + \mathbf{b}$$
$$\Leftrightarrow \mathbf{x} = -\mathbf{D}^{-1}\,(\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}.$$

Předpis Jacobiho metody:
$$\mathbf{x}^{i+1} = -\mathbf{D}^{-1}\,(\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x}^{i} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}, \quad i = 0, 1, \dots,$$

Předpis Jacobiho metody rozepsaný po složkách:
$$x_j^{i+1} = \frac{1}{a_{jj}}\left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}x_k^{i} - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk}x_k^{i}\right)$$

$$
\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 4 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 5 & 2 \\ 7 & 5 & -3 & 1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 \\ 7 & 5 & -3 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{D}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}}
$$

V tomto případě je tedy iterační matice dána vztahem $\mathbf{B} = -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U})$ a posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení právě tehdy, když $\rho\left(-\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U})\right) < 1$.

Tuto podmínku splňují například ostře diagonálně dominantní matice, tj. matice pro kterou platí

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \ldots, n.$$

2. GAUSSOVA-SEIDELOVA METODA

Nyní při výpočtu složek vektoru $\mathbf{x}^{i+1}$ použijeme místo složek vektoru $\mathbf{x}^i$ složky vektoru $\mathbf{x}^{i+1}$, pokud již byly vypočteny.

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\mathbf{D} + \mathbf{L})\,\mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\mathbf{D} + \mathbf{L})\,\mathbf{x} = -\mathbf{U}\mathbf{x} + \mathbf{b}$$
$$\Leftrightarrow \mathbf{x} = -\,(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\,\mathbf{U}\mathbf{x} + (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\,\mathbf{b}.$$

Předpis Gaussovy-Seidelovy metody:

$$\mathbf{x}^{i+1} = -\,(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\,\mathbf{U}\mathbf{x}^i + (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\,\mathbf{b}, \quad i = 0, 1, \ldots,$$

Předpis Gaussovy-Seidelovy metody rozepsaný po složkách:

$$x_j^{i+1} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk} x_k^{i+1} - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk} x_k^i \right)$$

V tomto případě tedy posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení právě tehdy, když $\rho\left(-\left(\mathbf{D}+\mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{U}\right) < 1$. Tuto podmínku splňují ostře diagonálně dominantní matice a také symetrické pozitivně definitní matice.

3. SUPERRELAXAČNÍ METODA (SOR METODA)

Pro zrychlení konvergence je možné použít modifikaci Gaussovy-Seidelovy metody, při které konstruujeme posloupnost vektorů podle vzorce

$$x_j^{i+1} = (1-\omega)\, x_j^i + \omega \tilde{x}_j^{i+1},$$

kde $\tilde{x}_j^{i+1}$ vypočteme pomocí jedné G.-S. iterace, tj.
$\tilde{x}_j^{i+1} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk} x_k^{i+1} - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk} x_k^i \right).$

V maticovém zápisu dostaneme
$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \omega\mathbf{A}\mathbf{x} = \omega\mathbf{b} \Leftrightarrow ((\omega-1)\,\mathbf{D} + \mathbf{D} + \omega\mathbf{L} + \omega\mathbf{U})\,\mathbf{x} = \omega\mathbf{b} \Leftrightarrow$
$(\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})\,\mathbf{x} = \omega\mathbf{b} - (\omega\mathbf{U} + (\omega-1)\,\mathbf{D})\,\mathbf{x},$
tedy $(\mathbf{D} + \omega\mathbf{L})\,\mathbf{x}^{i+1} = \omega\mathbf{b} - (\omega\mathbf{U} + (\omega-1)\,\mathbf{D})\,\mathbf{x}^i.$

Parametr ω se nazývá relaxační faktor a volí se z intervalu $(0,2)$, obvykle $\omega \in (1,2)$. Pro symetrické pozitivně definitní matice soustavy tato volba parametru vede ke konvergenci posloupnosti $\mathbf{x}^i$ k řešení. Volbou $\omega = 1$ dostaneme Gaussovu-Seidelovu metodu.

4. METODA SDRUŽENÝCH GRADIENTŮ

Budeme předpokládat, že matice soustavy $\mathbf{A}$ je symetrická pozitivně definitní. Potom řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ je jediným bodem, ve kterém má funkce

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{x}^T\mathbf{b}$$

minimum.

Posloupnost vektorů $\mathbf{x}^i$ budeme konstruovat tak, že v i-tém kroku zvolíme směr $\mathbf{v}^i$ a určíme číslo α_i tak, aby vektor

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{x}^i + \alpha_i\mathbf{v}^i$$

byl bodem minima funkce F na přímce $\mathbf{x}^i + t\mathbf{v}^i$, $t \in \mathbb{R}$.

Volbou $\mathbf{v}^i$ dostaneme konkrétní metodu. V případě metody sdružených gradientů volíme **A**-ortogonální vektory. To jsou vektory, pro které platí:

$$\left(\mathbf{v}^j\right)^T \mathbf{A}\mathbf{v}^i = 0, \quad i \neq j, \quad \text{a} \quad \left(\mathbf{v}^i\right)^T \mathbf{A}\mathbf{v}^i \neq 0.$$

Vektory konstruujeme postupně pomocí reziduí $\mathbf{r}^i = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^i$:

$$\mathbf{v}^{i+1} = \mathbf{r}^{i+1} + \beta_i \mathbf{v}^i,$$

kde konstanta β_i je zvolena tak, aby byla splněna **A**-ortogonalita vektorů $\mathbf{v}^{i+1}$ a $\mathbf{v}^i$.

Další iterační metody: MINRES, GMRES, BiCG a jejich modifikace

Algoritmus metody sdružených gradientů:

Je dáno: $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{A}$ symetrická pozitivně definitní, $\mathbf{b}$.

$\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0$, $\mathbf{v}^0 = \mathbf{r}^0$, $i = 0$

while $\left\|\mathbf{r}^i\right\|_2 > \epsilon$ and $i < maximum\_iteraci$

$$\alpha_i = \frac{\left(\mathbf{r}^i\right)^T \mathbf{v}^i}{(\mathbf{v}^i)^T \mathbf{A}\mathbf{v}^i}$$

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{x}^i + \alpha_i \mathbf{v}^i$$

$$\mathbf{r}^{i+1} = \mathbf{r}^i - \alpha_i \mathbf{A}\mathbf{v}^i$$

$$\beta_i = \frac{\left(\mathbf{r}^{i+1}\right)^T \mathbf{r}^{i+1}}{(\mathbf{r}^i)^T \mathbf{r}^i}$$

$$\mathbf{v}^{i+1} = \mathbf{r}^{i+1} + \beta_i \mathbf{v}^i$$

$$i = i + 1$$

end

Rychlost konvergence metody sdružených gradientů je charakterizována odhadem

$$\left\| \mathbf{x}^k - \mathbf{x}^* \right\|_A \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa_2(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa_2(\mathbf{A})} + 1} \right)^k \left\| \mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^* \right\|_A ,$$

kde $\|\cdot\|_A$ je energetická norma

$$\|\mathbf{x}\|_A = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}$$

a κ_2 označuje číslo podmíněnosti vzhledem k $\|\cdot\|_2$ normě

$$\kappa_2(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_2 \left\| \mathbf{A}^{-1} \right\|_2 .$$

Rychlost konvergence metody sdružených gradientů tedy závisí na čísle podmíněnosti matice soustavy. Konvergenci můžeme urychlit pomocí předpodmínění. Místo úlohy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ budeme řešit úlohu

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^{T}\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b},$$

tedy

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}},$$

kde

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{P}^{T}\mathbf{x}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}.$$

Matice $\mathbf{P}$ se nazývá předpodmiňovač a volíme ji tak, aby byla regulární a aby číslo podmíněnosti matice $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}$ bylo menší než číslo podmíněnosti matice $\mathbf{A}$.

Mezi nejjednodušší volbu patří

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \sqrt{a_{11}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{a_{22}} & 0 & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & \sqrt{a_{nn}} \end{pmatrix}.$$