5.124. Построить сходящийся метод простой итерации (5.7) для системы уравнений с матрицей

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0,5 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0,5 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0,5 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & \ldots & 0 & 0 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 1 & 0,5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 2 \end{pmatrix}.$$

О т в е т: матрица положительно определена и имеет два кратных собственных числа $\lambda_1 = 1$ и $\lambda_2 = 2$, поэтому условие сходимости имеет вид: $0 < \tau < \frac{1}{2}$.

5.125. При каких условиях итерационный метод

$$\mathbf{x}^{k+1} = (2B^2 - I)\mathbf{x}^k + 2(B + I)\mathbf{c}$$

сходится быстрее метода простой итерации $\mathbf{x}^{k+1} = B\mathbf{x}^k + \mathbf{c}$?

$\triangleleft$ Метод простой итерации $\mathbf{x}^{k+1} = B\mathbf{x}^k + \mathbf{c}$ сходится при $|\lambda_i(B)| < 1$. Для погрешности $\mathbf{z}^k$ метода $\mathbf{x}^{k+1} = (2B^2 - I)\mathbf{x}^k + 2(B + I)\mathbf{c}$ справедливо равенство $\mathbf{z}^{k+1} = (2B^2 - I)\mathbf{z}^k$, $\lambda_i(2B^2 - I) = 2\lambda_i^2(B) - 1$, и этот итерационный метод сходится быстрее метода простой итерации, если спектр матрицы B расположен в подмножестве единичного круга комплексной плоскости, где функция $|2z^2 - 1|$ меньше функции $|z|$. В частности, если спектр матрицы B вещественный, то он должен принадлежать объединению интервалов $\left(-1, -\frac{1}{2}\right)$ и $\left(\frac{1}{2}, 1\right)$. $\triangleright$

5.5. Вариационные методы

Класс вариационных методов строится как множество методов минимизации некоторых функционалов, минимум которых достигается на решении исходной системы линейных уравнений. Конкретный вид функционала и алгоритм минимизации определяют параметры итерационного процесса. Порядок сходимости рассматриваемых вариационных методов не хуже, чем у линейного одношагового метода. При этом для практической реализации данных методов не требуется знания границ m, M спектра матрицы A.

Метод наискорейшего градиентного спуска. Пусть $A = A^T > 0$. Расчетные формулы итерационного процесса имеют вид

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \tau_k(\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k), \quad \tau_k = \frac{(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}, \; k = 0, 1, \ldots,$$

где $\mathbf{r}^k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^k$ — вектор невязки.

Отметим, что в приведенных формулах на каждой итерации требуется два умножения матрицы A на вектор.

5.126. Преобразовать формулы метода наискорейшего градиентного спуска так, чтобы на каждой итерации использовалось одно умножение матрицы A на вектор.

Ответ: пусть векторы $\mathbf{x}^k$ и $\mathbf{r}^k$ известны, тогда последовательно вычислим:

$$1)\ \mathbf{y} = A\mathbf{r}^k;\, 2)\ \tau_k = \frac{(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(\mathbf{y}, \mathbf{r}^k)};\, 3)\ \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \tau_k \mathbf{r}^k;\, 4)\ \mathbf{r}^{k+1} = \mathbf{r}^k - \tau_k \mathbf{y}.$$

Здесь на каждой итерации присутствует только одно умножение матрицы A на вектор, однако требуется хранить два вектора вместо одного.

5.127. Пусть $A = A^T > 0$ и $F(\mathbf{x}) = (A\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2\,(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ — квадратичная функция. Доказать, что:

1) $F(\mathbf{x}) = ||\mathbf{x}^* - \mathbf{x}||_A^2 - ||\mathbf{x}^*||_A^2$, где $\mathbf{x}^*$ — точное решение системы $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$;

2) равенство $F(\mathbf{x}^*) = \min\limits_{\mathbf{x}} F(\mathbf{x})$ выполняется тогда и только тогда, когда $\mathbf{x}^*$ — решение системы $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$;

3) для градиента функции $F(\mathbf{x})$ справедлива формула

$$\operatorname{grad} F(\mathbf{x}) = 2\,(A\mathbf{x} - \mathbf{b}).$$

$\lhd$ 1) Преобразуем данное выражение

$$||\mathbf{x}^* - \mathbf{x}||_A^2 - ||\mathbf{x}^*||_A^2 = (A(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}) - (A\mathbf{x}^*, \mathbf{x}^*) =$$
$$= (A\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2\,(A\mathbf{x}^*, \mathbf{x}) = F(\mathbf{x}).$$

2) Если $A > 0$, то $(A(\mathbf{x}^* - \mathbf{x}), \mathbf{x}^* - \mathbf{x}) > 0$ при $\mathbf{x} \neq \mathbf{x}^*$, поэтому функция $F(\mathbf{x})$ имеет минимум, и притом единственный, при $\mathbf{x} = \mathbf{x}^*$.

3) Последнее утверждение проверяется покомпонентным дифференцированием: $\dfrac{\partial F(\mathbf{x})}{\partial x_i}$. $\rhd$

5.128. Пусть решение системы $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$ ищется как точка минимума функционала $F(\mathbf{x}) = (A\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2(\mathbf{b}, \mathbf{x})$ (см. 5.127) по следующему алгоритму:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - \delta_k \operatorname{grad} F(\mathbf{x}^k),$$

где параметр δ_k выбирается из условия минимума величины

$$F(\mathbf{x}^k - \delta_k \operatorname{grad} F(\mathbf{x}^k)).$$

Доказать, что $2\delta_k \equiv \tau_k = \dfrac{(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}$ и расчетные формулы совпадают с формулами наискорейшего градиентного спуска.

Указание. Подставив $\operatorname{grad} F(\mathbf{x}) = 2(A\mathbf{x} - \mathbf{b})$ в выражение для $\mathbf{x}^{k+1}$, получить

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + 2\delta_k(\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k).$$

Далее из условия $F'_{\delta_k}(\mathbf{x}^{k+1}) = 0$ найти $2\delta_k \equiv \tau_k = \dfrac{(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}$.

5.129. Показать, что на k-м шаге метода наискорейшего градиентного спуска минимизируется норма $\|\mathbf{z}^k\|_A = \sqrt{(A\mathbf{z}^k, \mathbf{z}^k)}$ вектора ошибки $\mathbf{z}^k = \mathbf{x} - \mathbf{x}^k$, где $\mathbf{x}$ — точное решение.

$\lhd$ Действительно, так как $\mathbf{z}^{k+1} = (I - \tau_k A)\mathbf{z}^k$, то

$$\|\mathbf{z}^{k+1}\|_A^2 = (A(I - \tau_k A)\mathbf{z}^k, (I - \tau_k A)\mathbf{z}^k) =$$
$$= \|\mathbf{z}^k\|_A^2 - 2\tau_k(A\mathbf{z}^k, A\mathbf{z}^k) + \tau_k^2(AA\mathbf{z}^k, A\mathbf{z}^k).$$

Отсюда после дифференцирования по τ_k находим, что минимум достигается при $\tau_k = \dfrac{(A\mathbf{z}^k, A\mathbf{z}^k)}{(AA\mathbf{z}^k, A\mathbf{z}^k)}$. Учитывая, что $A\mathbf{z}^k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^k = \mathbf{r}^k$, имеем $\tau_k = \dfrac{(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}$.

Отметим, что минимизация евклидовой нормы $\|\mathbf{z}^k\| = \sqrt{(\mathbf{z}^k, \mathbf{z}^k)}$ вектора ошибки приводит к неконструктивным формулам для параметра $\tau_k = \dfrac{(\mathbf{r}^k, \mathbf{z}^k)}{(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}$, так как вектор $\mathbf{z}^k$ неизвестен. $\rhd$

5.130. Пусть $A = A^T > 0$ и $\lambda(A) \in [m, M]$. Доказать, что метод наискорейшего градиентного спуска для решения системы $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ сходится с произвольного начального приближения и верна оценка

$$\|\mathbf{z}^k\|_A \leqslant \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^k \|\mathbf{z}^0\|_A, \quad \text{где } \mathbf{z}^k = \mathbf{x} - \mathbf{x}^k,\ \|\mathbf{z}\|_A^2 = (A\mathbf{z}, \mathbf{z}).$$

$\lhd$ Действительно, параметр τ_k минимизирует на k-м шаге норму $\|\mathbf{z}^k\|_A$, следовательно с параметром τ_0 оптимального линейного одношагового метода оценка не лучше:

$$\|\mathbf{z}^{k+1}\|_A = \min_{\tau_k} \|(I - \tau_k A)\mathbf{z}^k\|_A \leqslant \|(I - \tau_0 A)\mathbf{z}^k\|_A \leqslant$$
$$\leqslant \|I - \tau_0 A\|_A \|\mathbf{z}^k\|_A = \frac{M-m}{M+m}\|\mathbf{z}^k\|_A,$$

так как $A = A^T > 0$ и, учитывая 5.32, для произвольного τ_0 имеем $\|I - \tau_0 A\|_A = \|I - \tau_0 A\|_2$. $\rhd$

5.131. Пусть $A = A^T > 0$ и $\lambda(A) \in [m, M]$. Доказать следующую оценку скорости сходимости метода наискорейшего градиентного спуска

$$\|\mathbf{z}^k\|_2 \leqslant \left(1 - \frac{m}{M}\right)^k \|\mathbf{z}^0\|_2, \quad \text{где} \quad \mathbf{z}^k = \mathbf{x} - \mathbf{x}^k.$$

У к а з а н и е. Ведем следующие обозначения: $A\mathbf{e}_1 = m\,\mathbf{e}_1$, $A\mathbf{e}_2 = M\,\mathbf{e}_2$. Пусть $\mathbf{z}^k = \mathbf{e}_1 + \gamma\mathbf{e}_2$, где $\gamma \neq 0$ — произвольный параметр. Тогда $\mathbf{r}^k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^k = A\,\mathbf{z}^k$ и $\tau_k = \dfrac{(\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)} = \dfrac{m^2 + \gamma^2 M^2}{m^3 + \gamma^2 M^3}$. В результате подстановки имеем $\mathbf{z}^{k+1} = \dfrac{\gamma(M-m)}{m^3 + \gamma^2 M^3}(\gamma M^2\mathbf{e}_1 - m^2\mathbf{e}_2)$, что приводит к искомой оценке для этого частного случая. Если в разложении ошибки $\mathbf{z}^k$ присутствуют векторы, отвечающие собственным значениям $\lambda(A) \in (m, M)$, то несложно показать, что для соответствующих компонент $\mathbf{z}^{k+1}$ множитель перехода не превосходит величины $1 - \dfrac{m}{M}$.

5.132. Пусть $A = A^T > 0$ и $\lambda(A) \in [m, M]$. Доказать следующую оценку скорости сходимости метода наискорейшего градиентного спуска:

$$\|\mathbf{z}^k\|_2 \leqslant \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^k \sqrt{\frac{M}{m}}\|\mathbf{z}^0\|_2, \quad \mathbf{z}^k = \mathbf{x} - \mathbf{x}^k.$$

Метод минимальных невязок. Пусть $A = A^T > 0$. Расчетные формулы итерационного процесса имеют вид

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \tau_k(\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k), \quad \tau_k = \frac{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, A\mathbf{r}^k)}, \quad k = 0, 1, \ldots,$$

где $\mathbf{r}^k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^k$ — вектор невязки.

5.133. Показать, что на k-м шаге метода минимальных невязок минимизируется норма $\|\mathbf{z}^k\|_{A^2} = \sqrt{(A\mathbf{z}^k, A\mathbf{z}^k)}$ вектора ошибки $\mathbf{z}^k = \mathbf{x} - \mathbf{x}^k$.

$\lhd$ Действительно, так как $\mathbf{z}^{k+1} = (I - \tau_k A)\mathbf{z}^k$, то

$$\|\mathbf{z}^{k+1}\|^2_{A^2} = (A(I - \tau_k A)\mathbf{z}^k, A(I - \tau_k A)\mathbf{z}^k) =$$
$$= \|\mathbf{z}^k\|^2_{A^2} - 2\tau_k(A^2\mathbf{z}^k, A\mathbf{z}^k) + \tau_k^2(A^2\mathbf{z}^k, A^2\mathbf{z}^k).$$

Отсюда после дифференцирования по τ_k, учитывая, что $A\mathbf{z}^k = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^k = \mathbf{r}^k$, находим: минимум достигается при $\tau_k = \dfrac{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, A\mathbf{r}^k)}$. Итерационный алгоритм с таким набором параметров называется *методом минимальных невязок*, так как $\|\mathbf{z}^{k+1}\|^2_{A^2} = (A\mathbf{z}^{k+1}, A\mathbf{z}^{k+1}) = \|\mathbf{r}^{k+1}\|^2_2$. $\rhd$

5.134. Пусть $A = A^T > 0$ и $\lambda(A) \in [m, M]$. Доказать, метод минимальных невязок для системы $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ сходится с произвольного начального приближения и верна оценка

$$\|\mathbf{z}^k\|_{A^2} \leqslant \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^k \|\mathbf{z}^0\|_{A^2}, \quad \mathbf{z}^k = \mathbf{x} - \mathbf{x}^k, \ \|\mathbf{z}\|^2_{A^2} = (A\mathbf{z}, A\mathbf{z}).$$

Указание. См. решение 5.130, учитывая, что $\|I - \tau_0 A\|_{A^2} = \|I - \tau_0 A\|_2$.

5.135. Пусть $A + A^T > 0$ и $\mu = \dfrac{\lambda_{\min}(A + A^T)}{2}$, $\sigma = \|A\|_2$. Показать, что метод минимальных невязок для системы $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ сходится с произвольного начального приближения и верна оценка

$$\|\mathbf{r}^{k+1}\|_2 \leqslant \left(1 - \frac{\mu^2}{\sigma^2}\right)^{1/2} \|\mathbf{r}^k\|_2.$$

$\lhd$ Так как $\mathbf{z}^{k+1} = (I - \tau_k A)\mathbf{z}^k$, где $\tau_k = \dfrac{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)}{(A\mathbf{r}^k, A\mathbf{r}^k)}$, то

$$\|\mathbf{r}^{k+1}\|_2^2 = \|\mathbf{z}^{k+1}\|_{A^2}^2 = (A(I - \tau_k A)\mathbf{z}^k,$$

$$A(I - \tau_k A)\mathbf{z}^k) = \|\mathbf{r}^k\|_2^2 - 2\tau_k(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k) + \tau_k^2(A\mathbf{r}^k, A\mathbf{r}^k) = \|\mathbf{r}^k\|_2^2 - \frac{(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k)^2}{(A\mathbf{r}^k, A\mathbf{r}^k)}\,.$$

Отсюда, учитывая неравенства

$$(A\mathbf{r}^k, A\mathbf{r}^k) \leqslant \|A\|_2^2\|\mathbf{r}^k\|_2^2 \leqslant \sigma^2\|\mathbf{r}^k\|_2^2,$$

$$(A\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k) = \left(\frac{A + A^T}{2}\,\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k\right) + \left(\frac{A - A^T}{2}\,\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k\right) = \left(\frac{A + A^T}{2}\,\mathbf{r}^k, \mathbf{r}^k\right) \geqslant \mu\|\mathbf{r}^k\|_2^2,$$

имеем требуемую оценку. $\rhd$

5.136. Пусть $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, ..., \mathbf{e}_n$ — базис пространства $\mathbf{R}^n$. Доказать сходимость с произвольного начального приближения следующего итерационного метода (*метода оптимального координатного спуска*) решения невырожденной системы уравнений $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$:

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \frac{(\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k, A\mathbf{e}_j)}{||A\mathbf{e}_j||_2^2}\,\mathbf{e}_j, \quad j = \arg\max_l \frac{|(\mathbf{b} - A\mathbf{x}^k, A\mathbf{e}_l)|}{||A\mathbf{e}_l||_2}\,.$$

5.6. Неявные методы

Скорость сходимости рассмотренных итерационных процессов зависела от отношения $\frac{m}{M}$ границ спектра матрицы $A = A^T > 0$, т. е. от обусловленности задачи. Для «улучшения» исходной задачи можно перейти к некоторой эквивалентной системе $B^{-1}A\mathbf{x} = B^{-1}\mathbf{b}$ при условии невырожденности матрицы B

$$\frac{\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k}{\tau} + B^{-1}A\mathbf{x}^k = B^{-1}\mathbf{b}. \tag{5.9}$$

Метод спектрально-эквивалентных операторов. Пусть $A = A^T > 0$. Перепишем итерационный алгоритм (5.9) в следующем виде:

$$B\,\frac{\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k}{\tau} + A\mathbf{x}^k = \mathbf{b}, \tag{5.10}$$

который также называют *обобщенным методом простой итерации* или *методом с предобусловливателем* B.

Неявный двухслойный итерационный алгоритм (5.10) требует на каждом шаге решения задач вида $B\mathbf{y} = \mathbf{f}$ и совпадает с рассмотренными выше методами при $B = I$. Известно, что алгоритм (5.10) сходится при $B > \frac{\tau}{2}\,A$, $\tau > 0$. Если дополнительно $B = B^T > 0$ и $m_1 B \leqslant A \leqslant M_1 B$, то при $\tau = \dfrac{2}{m_1 + M_1}$ метод сходится со скоростью геометрической прогрессии