NUMERICKÉ METÓDY LINEÁRNEJ ALGEBRY

05. Iteračné metódy riešenia lineárnych sústav.

Ing. Marek Macák, PhD.

Konzultácie: podľa potreby/dohody

5. Marec 2024

Iteračné metódy riešenia

- Výsledkom *iteračných metód*, nazývaných aj *nepriame metódy*, je *približné riešenie*, ktoré je zaťažené nielen zaokrúhľovacími chybami, ale aj chybami metódy. Od požadovanej presnosti potom závisí *počet krokov = iterácií*.
- Na začiatku vždy volíme *počiatočnú aproximáciu riešenia* $\mathbf{x}^{(0)}$, ktorú potom iteračným procesom spresňujeme.
- Výpočet iterácií zastavujeme *zastavovacou podmienkou*, ktorá najčastejšie býva formulovaná v tvare
  a) veľkosť *rozdielu riešenia dvoch po sebe idúcich iterácií*, t. j. $\mathbf{r}^{(k)} = |\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}|$, $||\mathbf{r}^{(k)}|| \leq \varepsilon$,
  b) *rezíduum poslednej iterácie*, t. j. $\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)}$, $||\mathbf{r}^{(k)}|| \leq \varepsilon$.
- Iteračné metódy *môžu aj divergovať*, závisí to od vlastností matice systému a samotnej iteračnej metódy, viac neskôr.

Iteračné metódy riešenia

- Princíp *Jacobiho metódy*[1] vysvetlíme na:

$$
\begin{aligned}
a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1,\\
a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{2n}x_3 &= b_2,\\
a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{3n}x_3 &= b_3.
\end{aligned}
$$

Každú z rovníc vydelíme koeficientom a_{ii} za predpokladu, že $a_{ii} \neq 0$

$$
\begin{aligned}
x_1 + \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 + \frac{a_{13}}{a_{11}}x_3 &= \frac{b_1}{a_{11}},\\
\frac{a_{21}}{a_{22}}x_1 + x_2 + \frac{a_{23}}{a_{22}}x_3 &= \frac{b_2}{a_{22}},\\
\frac{a_{31}}{a_{33}}x_1 + \frac{a_{32}}{a_{33}}x_2 + x_3 &= \frac{b_3}{a_{33}}.
\end{aligned}
$$

[1] *Carl Gustav Jacob Jacobi* (1804 - 1851) bol nemecký matematik, ktorý okrem iného významne prispel do teórie systémov ODR a PDR 1. rádu, a k rozvoju diferenciálnej geometrie.

Iteračné metódy riešenia

- Potom z prvej rovnice vyjadríme x_1, z druhej rovnice vyjadríme x_2, z tretej rovnice vyjadríme x_3 a zapíšme nasledovne

$$
\begin{aligned}
x_1 &= 0 \cdot x_1 - \frac{a_{12}}{a_{11}} x_2 - \frac{a_{13}}{a_{11}} x_3 + \frac{b_1}{a_{11}},\\
x_2 &= -\frac{a_{21}}{a_{22}} x_1 + 0 \cdot x_2 - \frac{a_{23}}{a_{22}} x_3 + \frac{b_2}{a_{22}},\\
x_3 &= -\frac{a_{31}}{a_{33}} x_1 - \frac{a_{32}}{a_{33}} x_2 + 0 \cdot x_3 + \frac{b_3}{a_{33}},
\end{aligned}
$$

respektíve v maticovom tvare

$$
\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \frac{b_3}{a_{33}} \end{pmatrix}.
$$

Iteračné metódy riešenia

- *Iteračná formula* pre výpočet vektora $\mathbf{x}^{(k)}$, $k = 1, \ldots$, bude potom mať tvar

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k)} &= 0 \cdot x_1^{(k-1)} - \frac{a_{12}}{a_{11}} x_2^{(k-1)} - \frac{a_{13}}{a_{11}} x_3^{(k-1)} + \frac{b_1}{a_{11}}, \\
x_2^{(k)} &= -\frac{a_{21}}{a_{22}} x_1^{(k-1)} + 0 \cdot x_2^{(k-1)} - \frac{a_{23}}{a_{22}} x_3^{(k-1)} + \frac{b_2}{a_{22}}, \\
x_3^{(k)} &= -\frac{a_{31}}{a_{33}} x_1^{(k-1)} - \frac{a_{32}}{a_{33}} x_2^{(k-1)} + 0 \cdot x_3^{(k-1)} + \frac{b_3}{a_{33}},
\end{aligned}
$$

respektíve

$$
\begin{pmatrix} x_1^{(k)} \\ x_2^{(k)} \\ x_3^{(k)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1^{(k-1)} \\ x_2^{(k-1)} \\ x_3^{(k-1)} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \frac{b_3}{a_{33}} \end{pmatrix}.
$$

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:
  - Zvoľ počiatočnú aproximáciu $x^{(0)} \in \mathbb{C}^{n\times 1}$
  - Pre k = 0, 1, 2, . . . opakuj až po konvergenciu

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

  kde B a c závisia od iteračnej metódy.

- Stacionárne iteračné metódy poznáme: *Jacobi, Gauss-Seidel* , *Successive Overrelaxation (SOR) a Symmetric Successive Overrelaxation (SSOR)*.

Rozklad matice A

- Základný rozklad matice A (nie faktorizácia):

  $$A = D - L - U,$$

  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'):

  $$A = M - N,$$

  napr. $M = D$ a $N = -(L + U)$.

Jacobiho metóda

- Všeobecne *Jacobiho metódu* môžeme napísať nasledovne: Vyberme i-tu rovnicu

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j = b_i$$

riešime pre hodnotu x_i za predpokladu, že ostatné zložky x zostanú pevné, a dostaneme

$$x_i = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1, i \neq j}^{n} a_{ij} x_j \right) .$$

- To určuje iteračnej metóde definovanú pomocou

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1, i \neq j}^{n} a_{ij} x_j^{(k-1)} \right) . \tag{2}$$

Jacobiho metóda

- Jacobiho metóda je založená na riešení pre každdú premennú lokálne vzhľadom na iné premenné.
- Jedna iterácia metódy zodpovedá riešeniu pre každdú premenn raz.
- Výsledná metóda je ľahko pochopiteľná a implementovateľná, ale konvergencia je pomalá.
- V maticovom vyjadrení môže byť Jacobiho metóda vyjadrená ako:

$$x^{(k)} = D^{-1}(L + U)x^{(k-1)} + D^{-1}b. \tag{3}$$

kde $D^{-1}(L + U) = \mathbf{B}$ a $D^{-1}b = \mathbf{c}$

Jacobiho metóda

- **Príklad:** Jacobiho metódou nájdite riešenie sústavy lineárnych rovníc s presnosťou $|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}| < 0,1$:

$$
\begin{aligned}
4x_1 - 0,8x_2 - 0,5x_3 &= 14,5 \\
0,3x_1 + 17x_2 - 0,9x_3 &= -19,3 \\
0,85x_1 - 0,2x_2 + 7x_3 &= 61,4
\end{aligned}
$$

  keď počiatočná aproximácia riešenia je $\mathbf{x}^{(0)} = (0;0;0)^T$.

Jacobiho metóda

- Riešenie: **Prvá iterácia**: Dosadíme $x_1^{(0)} = 0$, $x_2^{(0)} = 0$ a $x_3^{(0)} = 0$ do (1) a vyčíslime

$$
\begin{aligned}
x_1^{(1)} &= 0 \cdot x_1^{(0)} - \frac{a_{12}}{a_{11}} x_2^{(0)} - \frac{a_{13}}{a_{11}} x_3^{(0)} + \frac{b_1}{a_{11}} = \frac{1}{4} \cdot 14,5 = 3,6250 \\
x_2^{(1)} &= -\frac{a_{21}}{a_{22}} x_1^{(0)} + 0 \cdot x_2^{(0)} - \frac{a_{23}}{a_{22}} x_3^{(0)} + \frac{b_2}{a_{22}} = \frac{1}{17} \cdot -19,3 = -1,1353 \\
x_3^{(1)} &= -\frac{a_{31}}{a_{33}} x_1^{(0)} - \frac{a_{32}}{a_{33}} x_2^{(0)} + 0 \cdot x_3^{(0)} + \frac{b_3}{a_{33}} = \frac{1}{7} \cdot 61,4 = 8,7714
\end{aligned}
$$

Spočítame rozdiely medzi iteráciami

$$
\begin{aligned}
|x_1^{(1)} - x_1^{(0)}| &= |3,6250 - 0| = 3,6250 \\
|x_2^{(1)} - x_2^{(0)}| &= |-1,1353 - 0| = 1,1353 \\
|x_3^{(1)} - x_2^{(0)}| &= |8,7714 - 0| = 8,7714
\end{aligned}
$$

Jacobiho metóda

- **Druhá iterácia**: dosadíme $x_1^{(1)} = 3,6250$, $x_2^{(1)} = -1,1353$ a $x_3^{(1)} = 8,7714$ a vypočítame

$$
\begin{aligned}
x_1^{(2)} &= \frac{1}{4}[14,5 - (-0,8)\cdot(-1,1353) - (-0,5)\cdot 8,7714] = 4,4944 \\
x_2^{(2)} &= \frac{1}{17}[-19,3 - 0,3\cdot 3,6250 - (-0,9)\cdot 8,7714] = -0,7349 \\
x_3^{(2)} &= = \frac{1}{7}[61,4 - 0,85\cdot 3,6250 - (-0,2)\cdot(-1,1353)] = 8,2988
\end{aligned}
$$

a spočítame rozdiely medzi iteráciami

$$
\begin{aligned}
|x_1^{(2)} - x_1^{(1)}| &= |4,4944 - 3,6250| = 0,8694 \\
|x_2^{(2)} - x_2^{(1)}| &= |-0,7349 + 1,1353| = 0,4004 \\
|x_3^{(2)} - x_2^{(1)}| &= |8,2988 - 8,7714| = 0,4726
\end{aligned}
$$

Jacobiho metóda

- **Tretia iterácia**: dosadíme $x_1^{(2)} = 4,4944$, $x_2^{(2)} = -0,7349$ a $x_3^{(2)} = 8,2988$ a vypočítame

$$
\begin{aligned}
x_1^{(3)} &= \; = \frac{1}{4}\left[14,5 - (-0,8)\cdot(-0,7349) - (-0,5)\cdot 8,2988\right] = 4,5154 \\
x_2^{(3)} &= \frac{1}{17}\left[-19,3 - 0,3\cdot 4,4944 - (-0,9)\cdot 8,2988\right] = -0,7753 \\
x_3^{(3)} &= \; = \frac{1}{7}\left[61,4 - 0,85\cdot 4,4944 - (-0,2)\cdot(-0,7349)\right] = 8,2047
\end{aligned}
$$

a opäť vyčíslime rozdiely medzi iteráciami

$$
\begin{aligned}
|x_1^{(3)} - x_1^{(2)}| &= |4,5154 - 4,4944| = 0,0210 \\
|x_2^{(3)} - x_2^{(2)}| &= |-0,7753 + 0,7349| = 0,0404 \\
|x_3^{(3)} - x_2^{(2)}| &= |8,2047 - 8,2988| = 0,0941
\end{aligned}
$$

Jacobiho metóda

- *Pseudo algoritmus Jacobiho metódy:*

```
Zvoľte počiatočný odhad x^(0) riešenia x.
for k = 1, 2, ...
   for i = 1, 2, ..., n
   x̄_i = 0
      for j = 1, 2, ..., i − 1, i + 1, ..., n
      x̄_i = x̄_i + a_{i,j} x_j^(k−1)
      end
   x̄_i = (b_i − x̄_i)/a_{i,i}
   end
x^(k) = x̄
skontrolujte konvergenciu; pokračujte ak treba
end
```

Gauss-Seidelova metóda

- Princíp *Gauss-Seidelovej metódy*[2]vysvetlíme na rovnakom príklade ako pri *Jacobiho metóde*, t. j.

$$\begin{aligned} x_1 &= 0 \cdot x_1 - \frac{a_{12}}{a_{11}} x_2 - \frac{a_{13}}{a_{11}} x_3 + \frac{b_1}{a_{11}}, \\ x_2 &= -\frac{a_{21}}{a_{22}} x_1 + 0 \cdot x_2 - \frac{a_{23}}{a_{22}} x_3 + \frac{b_2}{a_{22}}, \\ x_3 &= -\frac{a_{31}}{a_{33}} x_1 - \frac{a_{32}}{a_{33}} x_2 + 0 \cdot x_3 + \frac{b_3}{a_{33}}. \end{aligned}$$

[2]Autormi *Gauss-Seidelovej* metódy sú nemeckí matematici *Carl Friedrich Gauss* a *Philipp Ludwig von Seidel* (1821 - 1896).

Gauss-Seidelova metóda

- Gauss-Seidelova metóda je podobná Jacobiho metóde, s tým rozdielom, že *na výpočet iterácií jednotlivých súradníc vektora riešení používa predchádzajúce súradnice ihneď po ich vypočítaní*, t. j. *iteračný predpis* bude mať tvar

$$
\begin{aligned}
x_1^{(k)} &= 0 \cdot x_1^{(k-1)} - \frac{a_{12}}{a_{11}} x_2^{(k-1)} - \frac{a_{13}}{a_{11}} x_3^{(k-1)} + \frac{b_1}{a_{11}}, \\
x_2^{(k)} &= -\frac{a_{21}}{a_{22}} x_1^{(k)} + 0 \cdot x_2^{(k-1)} - \frac{a_{23}}{a_{22}} x_3^{(k-1)} + \frac{b_2}{a_{22}}, \\
x_3^{(k)} &= -\frac{a_{31}}{a_{33}} x_1^{(k)} - \frac{a_{32}}{a_{33}} x_2^{(k)} + 0 \cdot x_3^{(k-1)} + \frac{b_3}{a_{33}}.
\end{aligned}
$$

Gauss-Seidelova metóda

- Všeobecne pre výpočet hodnoty x_i pomocou *Gauss-Seidelovej metódy* môžeme napísať

$$x_i^{(k)} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k-1)} \right). \tag{4}$$

- V tejto metóde využijeme fakt, že pri i-tej rovnici riešenia $(k+1)$-vej iterácie poznáme okrem celého vektora $\mathbf{x}^{(k)}$ aj prvých $i-1$ zložiek vektora $(k+1)$ -vej iterácie. A teda tieto hodnoty môžeme využiť.

Gauss-Seidelova metóda

- Gauss-Seidelova metóda je ako Jacobiho metóda, až na to, že používa aktualizované hodnoty ako hneď ako budú k dispozícii.
- Vo všeobecnosti, ak Jacobiho metóda konverguje, Gauss-Seidel metóda bude konvergovať rýchlejšie ako Jacobiho metóda, aj keď stále relatívne pomaly.
- V inom maticovom vyjadrení môže byť Gauss-Seidelova metóda napísaná ako:

$$x^{(k)} = (D - L)^{-1}(Ux^{(k-1)} + b). \tag{5}$$

kde $U(D - L)^{-1} = \mathbf{B}$ a $(D - L)^{-1}b = \mathbf{c}$

Gauss-Seidelova metóda

- *Preudo algoritmus Gauss-Seidelovej metódy:*

Zvoľte počiatočný odhad $x^{(0)}$ riešenia x.
for $k = 1, 2, ...$
  for $i = 1, 2, ..., n$
  $\sigma = 0$
    for $j = 1, 2, ..., i-1$
    $\sigma = \sigma + a_{i,j} x_j^{(k)}$
    end
    for $j = i+1, ..., n$
    $\sigma = \sigma + a_{i,j} x_j^{(k-1)}$
    end
  $x_i^{(k)} = (b_{i,j} - \sigma)/a_{i,i}$
  end
skontrolujte konvergenciu; pokračujte ak treba
end

SOR metóda

- *Metóda SOR* (Successive Over-Relaxation)[3] je podobná Gauss-Seidelovej metóde, ale využíva relaxačný koeficient ω pre rýchlejšie dosiahnutie požadovanej presnosti riešenia.
- Metóda SOR je navrhnutá aplikáciou 'relaxácie' na Gauss-Seidelovu metódu. Táto 'relaxácia' má formu váženého priemeru medzi predchádzajúcou iteráciou a vypočítanou Gauss-Seidelovou iteráciou postupne pre každú zložku:

$$x_i^{(k)} = \omega \tilde{x}_i^{(k)} + (1-\omega) x_i^{(k-1)}. \tag{6}$$

  kde $\tilde{x}$ označuje Gauss-Seidelovu iteráciu a ω je relaxačný faktor.
- Úlohou je vybrať ω ktoré urýchli rýchlosť konvergencie k riešeniu.

[3] Autormi *SOR* metódy americkí matematici David Monaghan Young, Jr. (1923 - 2008) a Stan Frankel (1919 - 1978)

SOR metóda

- Všeobecný iteračný predpis pre výpočet hodnoty x_i pomocou *SOR metódy* je nasledovný

$$x_i^{(k)} = (1-\omega)x_i^{(k-1)} + \frac{\omega}{a_{i,i}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_j^{(k-1)}\right). \tag{7}$$

- Hodnota ω sa volí v intervale $(0,2)$. Pre $\omega = 1$ je metóda totožná s Gauss-Seidelovu metódou.
- V inom maticovom vyjadrení môže byť SOR metóda napísaná ako:

$$x^{(k)} = (D-\omega L)^{-1}(\omega U + (1-\omega)D)x^{(k-1)} + \omega(D-\omega L)^{-1}b. \tag{8}$$

SOR metóda

- Doteraz nie je známa metóda pre výber optimálnej hodnoty ω pre ľubovoľnú maticu A. Ale takéto kritérium je známe pre dôležitú triedu matíc.
- V práci Kahan[4] je ukazané, že SOR nekonverguje, ak je ω mimo intervalu $(0, 2)$.
- Nech matica A je SPD a nech $0 < \omega < 2$. Potom metóda SOR konverguje pre ľubovoľný počiatočný vektor $x^{(0)}$.
- Jeden zo spôsobov výpočtu parametru

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2}} \tag{9}$$

kde ρ je spektrálny polomer Jacobiho iteračnej matice.

[4] W. KAHAN, Gauss-Seidel methods of solving large systems of linear equations, PhD thesis, University of Toronto, 1958

SOR metóda

- *Pseudo algoritmus SOR metódy:*

Zvoľte počiatočný odhad $x^{(0)}$ riešenia x a hodnotu ω.
for $k = 1, 2, \ldots$
  for $i = 1, 2, \ldots, n$
  $\sigma = 0$
    for $j = 1, 2, \ldots, i-1$
    $\sigma = \sigma + a_{i,j} x_j^{(k)}$
    end
    for $j = i+1, \ldots, n$
    $\sigma = \sigma + a_{i,j} x_j^{(k-1)}$
    end
  $\sigma = (b_{i,j} - \sigma)/a_{i,i}$
  $x_i^{(k)} = (1-\omega) x_i^{(k-1)} + \omega\sigma$
  end
skontrolujte konvergenciu; pokračujte ak treba
end

Konvergencia

- Ak všeobecný iteračný proces (VIP): $x^{(k)} = \mathbf{B}x^{(k-1)} + \mathbf{c}$ konverguje, potom v limite $k \to \infty$ platí: $x^{(\star)} = \mathbf{B}x^{(\star)} + \mathbf{c}$.
- Nech $\rho(\mathbf{B})$ je spektrálny polomer matice $\mathbf{B}$ a nech $\rho(\mathbf{B}) < 1$. Potom $(I - \mathbf{B})$ je regulárna a VIP konverguje pre ľubovoľný počiatočný vektor $x^{(0)}$. A naopak: ak VIP konverguje pre ľubovoľné $x^{(0)}$, potom $\rho(\mathbf{B}) < 1$.
- Ak je matica A SDD, potom Jacobiho i Gaussova-Seidelova metóda konvergujú pre ľubovoľný počiatočný vektor $x^{(0)}$, pričom Gaussova-Seidelova metóda konverguje rýchlejšie.
- Ak je matica A je SPD, potom Gaussova-Seidelova metóda konverguje pre ľubovoľný počiatočný vektor $x^{(0)}$.

Rýchlosť konvergencie

- Nech A je konzistentne usporiadaná matica s nenulovými diagonálnymi prvkami. Nech sú všetky vlastné čísla matice $\mathbf{B}_J$ Jacobiho iteračnej metódy reálne a nech $\rho(\mathbf{B}_J) < 1$. Nech R_{GS} a R_{SOR} značia rýchlosti konvergencie metódy GS a SOR s optimálnou hodnotou relaxačného parametra ω. Potom

$$2\rho(\mathbf{B}_J)R_{GS}^{1/2} \leq R_{SOR} \leq R_{GS} + 2R_{GS}^{1/2} \tag{10}$$

pričom nerovnosť pravo platí, ak $R_{GS} \leq 3$.