Итерационные методы решения систем линейных уравнений.

Задача 1. Для решения системы линейных уравнений

$$-\frac{y_{k+1}-2y_k+y_{k-1}}{h^2}+p\,y_k=f_k,\ k=1,...,N-1,$$
$$y_0=y_N=0,\ h=1/N,\ p\ge 0,$$

реализуйте метод Фурье (т.е. метод разложения по собственным векторам).

Указание. Перепишем задачу в матричном виде относительно вектора $\mathbf{y}=[y_1,\dots,y_{N-1}]^T$, т.е. $A\mathbf{y}=\mathbf{f}$, где $\mathbf{y},\mathbf{f}\in\mathbf{R}^{N-1}$. Для собственных чисел λ_n и собственных векторов $\psi^{(n)}$ данной матрицы известны аналитические формулы, а собственные векторы ортогональны относительно стандартного скалярного произведения, т.е. образуют базис в пространстве $\mathbf{R}^{N-1}$. Следовательно, формально существует разложение $\mathbf{y}=\sum_{n=1}^{N-1}c_n\psi^{(n)}$. Подставив соотношение в исходную систему, получим

$$A(\sum_{n=1}^{N-1}c_n\psi^{(n)})=\mathbf{f}\quad\Rightarrow\quad\sum_{n=1}^{N-1}c_n\lambda_n\psi^{(n)}=\mathbf{f}.$$

Умножим равенство скалярно на $\psi^{(m)}$, $m=1,\dots,N-1$. С учетом ортогональности базиса найдем:

$$\Big(\sum_{n=1}^{N-1}\lambda_n c_n\psi^{(n)},\psi^{(m)}\Big)_h=(\mathbf{f},\psi^{(m)})_h\quad\Rightarrow\quad c_m=\frac{(\mathbf{f},\psi^{(m)})_h}{\lambda_m(\psi^{(m)},\psi^{(m)})_h}.$$

Таким образом $c_m=d_m/\lambda_m$, где величины $d_m=\frac{(\mathbf{f},\psi^{(m)})_h}{(\psi^{(m)},\psi^{(m)})_h}$ являются коэффициентами в разложении вектора $\mathbf{f}=\sum\limits_{m=1}^{N-1}d_m\psi^{(m)}$. Определив набор коэффициентов $\{c_m\}$, далее вычисляем координаты искомого вектора $\mathbf{y}_k=\sum_{m=1}^{N-1}c_m\psi_k^{(m)}$, $k=0,\dots,N$.

Отметим, что в данном случае $(\psi^{(m)},\psi^{(m)})_h=\frac{1}{2}$ при всех $m=1,\dots,N-1$, а нахождение коэффициентов d_m и восстановление решения y_k можно существенно ускорить за счет арифметических свойств собственных функций при помощи так называемого быстрого преобразования Фурье.

Алгоритм Фурье относится к классу *точных* методов, т.е. при отсутствии ошибок округления позволяет найти точное решение системы за конечное число арифметических действий. Однако, жесткие требования к структуре матрицы ограничивают область его применимости. Рассматриваемые далее *итерационные* алгоритмы за конечное число арифметических действий обычно позволяют только приблизиться с некоторой точностью к искомому решению. Однако, в силу своей специфики могут применяться для решения различных прикладных задач большой размерности. Для постоения алгоритмов такого типа преобразуем исходную систему $A\,\mathbf{x}=\mathbf{b}$ к эквивалентному виду $\dfrac{\mathbf{x}-\mathbf{x}}{\tau}+A\,\mathbf{x}=\mathbf{b}$, здесь τ — действительное число (итерационный параметр). Выберем некоторое начальное приближение $\mathbf{x}^0$, например, положим $\mathbf{x}^0\equiv 0$, и будем определять последующие приближения $\mathbf{x}^1,\mathbf{x}^2,\dots$ по формуле

$$\frac{\mathbf{x}^{k+1}-\mathbf{x}^k}{\tau}+A\,\mathbf{x}^k=\mathbf{b},\ \Leftrightarrow\mathbf{x}^{k+1}=(I-\tau\,A)\mathbf{x}^k+\tau\,\mathbf{b}.$$

Такой процесс называется двухслойным итерационным методом с постоянным шагом. Можно доказать, что если взять достаточно малое $\tau>0$, то для некоторого класса матриц (например, положительно определенных матриц A простой структуры) алгоритм будет сходиться с произвольного начального приближения $\mathbf{x}^0$ со скоростью геометрической прогрессии с показателем $q<1$. Однако отметим, что при $\tau\to 0$ имеем $q\sim(1-c\tau)$, т.е. сходимость замедляется.

Если $A=A^T>0$ и для произвольного вектора $\mathbf{y}$ выполнятся оценка $0<m\le\dfrac{(A\mathbf{y},\mathbf{y})}{(\mathbf{y},\mathbf{y})}\le M$, т.е. $\lambda(A)\in[m,M]$, то в некотором смысле наивысшую скорость сходимости обеспечивает выбор $\tau_0=\dfrac{2}{m+M}$. В этом случае $\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^k\|_2\le q_0^k\|\mathbf{x}-\mathbf{x}^0\|_2$, $q_0=\dfrac{M-m}{M+m}$. Таким образом данный алгоритм, часто называемый в литературе методом Ричардсона, требует для реализации априорную информацию о границах спектра: $m\le\lambda(A)\le M$. Необходимые для проведения расчетов конкретные значения m и M, равные для $A=A^T>0$ наибольшему и наименьшему собственным числам соответственно, можно оценить по теореме Гершгорина: все собственные значения λ произвольной матрицы A принадлежат объединению кругов $O_i=\{|z-a_{ii}|\le\sum\limits_{j\ne i}|a_{ij}|\},\quad i=0,1,\dots,n-1$, в комплексной плоскости; если же указанное объединение кругов распадается на несколько связных частей, то каждая такая часть содержит столько собственных значений, сколько кругов ее составляют.

Для действительных матриц из теоремы Гершгорина находим:

$$M \le \max_i \sum_j |a_{ij}|, \quad m \ge \min_i (a_{ii} - \sum_{j \ne i} |a_{ij}|).$$

Отметим, что для матриц $A = A^T > 0$ всегда можно грубо положить $m \approx 0$, т.е. $\tau = \dfrac{2}{M}$, хотя формально это дает завышенную оценку $q = 1$.

Задача 2. Для решения системы линейных уравнений из Задачи 1 реализуйте метод Ричардсона в виде функции

```
double Richardson(double *x, const double *A,
          const double *b, double tau, int n, double eps, int mIter);
```

возвращающей найденное приближение x и норму вектора невязки $\|\mathbf{b} - A\mathbf{x}\|_h$. На задаче $A\mathbf{x}^* = \mathbf{b}$ с известным решением проведите тестирование программы, сравнив теоретическую и реальную скорость сходимости. Для этого на каждом k-ом шаге, $k = 0, 1, \ldots$, итерационного процесса сохраните в некоторый файл очередную тройку

$$k \quad \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^k\|_h \quad q_0^k \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^0\|_h$$

По завершении работы программы постройте графики полученных дискретных функций.

Если матрица A имеет большой разброс собственных чисел и величина $\xi = m/M$ мала, то для рассмотренных алгоритмов скорость сходимости $q \sim 1 - 2\xi$ близка к единице. В этом случае эффективные алгоритмы удается построить в виде

$$B\frac{\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k}{\tau} + A\mathbf{x}^k = \mathbf{b} \;\Leftrightarrow B\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}^k,\; \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \tau\mathbf{y}^{k+1}.$$

При этом матрицу B стараются выбрать максимально близкой к матрицей A при условии, что система уравнений $B\mathbf{y}^{k+1} = \mathbf{r}^k$ решается быстро. Пусть $A = D + L + R$, где D — диагональная матрица, L и R — соответственно левая нижняя и правая верхняя треугольные матрицы с нулевыми диагоналями (строго нижняя и строго верхняя треугольные матрицы). Тогда для расчетов можно применять следующие алгоритмы:
метод Якоби ($B = D$, $\tau = 1$):

$$D(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) + A\mathbf{x}^k = \mathbf{b} \;\Leftrightarrow\; D\mathbf{x}^{k+1} + (L + R)\mathbf{x}^k = \mathbf{b}\,;$$

метод Гаусса–Зейделя ($B = D + L$, $\tau = 1$):

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

Пусть матрица A обладает свойством диагонального преобладания, т.е. справедливо $\sum\limits_{i \ne j} |a_{ij}| \le q|a_{ii}|,\; i = 0, 1, \ldots, n-1, \quad q < 1$. Тогда методы Якоби и Гаусса–Зейделя сходятся с любого начального приближения и верна оценка $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^k\|_\infty \le q^k\,\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^0\|_\infty$, где $\|\mathbf{z}\|_\infty = \max_i |z_i|$.

Задача 3. Для решения системы линейных уравнений

$$-\frac{y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}}{h^2} + p_k\, y_k = f_k,\; k = 1, ..., N-1,$$
$$y_0 = y_N = 0,\; h = \pi/N,\; p_k = 1 + \sin^2 \pi k h$$

реализуйте метод с предобуславливателем в виде функции с прототипом

```
double BSolver(double *x, const double *A, const double *B,
    const double *b,  double  tau,  int n, double eps, int mIter);
```

возвращающей найденное приближенное решение x и норму $\|\mathbf{r}\|_h$ вектора невязки $\mathbf{r} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}$. В качестве B возьмите матрицу из Задачи 1 и примените для ее обращения метод Фурье. Сравните теоретическую и практическую скорости сходимости в указанной норме.