Численные методы
Лекция 4

Е.А. Яревский

25 ноября 2020

Итерационные методы решения СЛАУ

Итерационные методы:
основная "дорогая" операция – умножения матрицы на вектор.
Особенно эффективны для разреженных матриц.
Преобразуем СЛАУ

$$Ax = b$$

к виду

$$x = Bx + c \tag{1}$$

и ищем её решение как предел последовательности

$$x^{k+1} = Bx^k + c.$$

Например,

$$x^{k+1} = x^k + H_k(b - Ax^k) = (I - H_kA)x^k + H_kb.$$

Различные матрицы H_k (предобуславливатели) – различные итерационные процессы.

Точное решение - неподвижная точка (1).
Приближение к решению часто оценивают по невязке:

$$r^k = b - Ax^k.$$

Не единственный и не лучший, но очень простой способ.
Для ошибки $e^k = x - x^k$ находим

$$e^{k+1} = (I - H_k A)e^k.$$

Стационарные процессы: $H_k = H$ не зависит от k.
Эквивалентен решению системы

$$HAx = Hb,$$

симметричный вариант:

$$HAH^\top y = Hb, \quad H^\top y = x.$$

Метод итерации в общем случае

Исходное уравнение преобразуется к виду

$$\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$$

и решается итерационным процессом $\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{g}(\mathbf{x}^n)$.
H – полное метрическое пр-во, оператор $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ отображает его в себя.
Если при некотором $q < 1$ отображение $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ удовлетворяет

$$\rho(\mathbf{g}(\mathbf{x}_1), \mathbf{g}(\mathbf{x}_2)) \leq q\rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$$

при всех $\mathbf{x}_1$, $\mathbf{x}_2$, то такое отображение называется сжимающим.
Теорема. Если отображение $\mathbf{y} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ – сжимающее, то уравнение $\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x})$ имеет единственное решение $\mathbf{X}$ и

$$\rho(\mathbf{X}, \mathbf{x}^n) \leq \frac{q^n a}{1 - q},$$

где $a = \rho(\mathbf{x}^1, \mathbf{x}^0)$.

Метод итерации в общем случае

<u>План доказательства:</u>

- $\rho(\mathbf{x}^{n+1}, \mathbf{x}^n) \leq q^n a$
- для $l > n$, $\rho(\mathbf{x}^l, \mathbf{x}^n) \leq \frac{q^n a}{1-q}$ – последовательность Коши
- предел $l \to \infty$: $\rho(\mathbf{X}, \mathbf{x}^n) \leq \frac{q^n a}{1-q}$
- $\rho(\mathbf{X}, \mathbf{g}(\mathbf{X})) = 0$, т.е. $\mathbf{X} = \mathbf{g}(\mathbf{X})$
- единственность

Сходимость метода

Стационарный процесс:
применим теорему о сжимающем отображении:

$$||(Bx + c) - (By + c)|| = ||B(x - y)|| \leq ||B||\ ||x - y||.$$

Решение существует и единственно при $q = ||B|| < 1$.
Сходимость – линейная.

В нестационарном случае:
для сходимости метода необходимо и достаточно

$$T_k = (I - H_k A)(I - H_{k-1} A) \dots (I - H_1 A) \to 0 \quad \text{при} \quad k \to \infty.$$

Критерии остановки итерационного процесса:

- невязка становится малой,

$$||r^k|| \leq \varepsilon ||b||.$$

  Хорошо работает для хорошо обусловленных систем.

- решение перестает меняться, т.е. приращение становится малым,

$$[1 - q]||e^k|| \leq ||x^{k+1} - x^k|| \leq \varepsilon ||b||.$$

  Хорошо работает при быстрой сходимости, $q \ll 1$.

Обычно требуется комбинация обоих подходов.

Итерационные методы решения СЛАУ

Для построения простых методов можно использовать расщепление матрицы

$$A = L + U + D$$

.

- метод Якоби ($H = D^{-1}$)
- метод Гаусса-Зейделя ($H = (L + D)^{-1}$)
- метод последовательной верхней релаксации (SOR)
- градиентные методы: метод наискорейшего спуска, метод сопряжённых градиентов
- мультисеточные методы (MG, AMG, ...)
- ...

Метод Якоби

Представим матрицу A в виде $A = B + D$, где $D = \mathrm{diag}\{a_{11}, \dots, a_{NN}\}$.
Предположим, что $\det D \neq 0$ (т.е. $a_{ii} \neq 0$. Этого можно добиться перестановкой строк и столбцов при $\det A \neq 0$.)
Запишем СЛАУ в виде:

$$Ax = Dx + Bx = b, \quad x = D^{-1}b - D^{-1}Bx.$$

Итерационная процедура:

$$x^{k+1} = D^{-1}b - D^{-1}Bx^k,$$

или

$$x_i^{k+1} = a_{ii}^{-1}b_i - a_{ii}^{-1}\sum_{j=1, j\neq i}^{N} a_{ij}x_j^k, \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

Как было показано, итерационный процесс сходится, если

$$||D^{-1}B|| = ||D^{-1}(A - D)|| < 1.$$

Как проверить выполнение этого условия?
В конечномерном пространстве все нормы эквивалентны.
Выберем норму $|| * ||_\infty$:

$$||x||_\infty = \max_{1 \le i \le N} |x_i|, \quad ||A||_\infty = \max_{1 \le i \le N} \sum_{j=1}^{N} |a_{ij}|.$$

$$||D^{-1}B||_\infty = \max_{1 \le i \le N} |a_{ii}^{-1}| \sum_{j=1, j \ne i}^{N} |a_{ij}|.$$

Норма меньше 1, если $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \ne i}^{N} |a_{ij}|$ для всех i – матрица с диагональным преобладанием.

Оценка погрешности

Знаем последовательность x^k, хотим оценить близость к решению: $x^k - X$. Воспользуемся выводом теоремы о сжимающем отображении:

$$||x^k - X|| \leq \frac{q}{1-q}||x^k - x^{k-1}||.$$

Коэффициент сжатия q – максимальное собственное число $D^{-1}B = M$. На каждом шаге его можно оценить как q_k:

$$q_k = \frac{(x^k - x^{k-1}, x^k - x^{k-1})}{(x^{k-1} - x^{k-2}, x^k - x^{k-1})} = \frac{(Ms, Ms)}{(s, Ms)}, \qquad s = x^{k-1} - x^{k-2}.$$

(при выполнении некоторых условий; будет обсуждаться в теме вычисления собственных значений матриц).

Метод Зейделя

Перепишем итерационный процесс:

$$x_i^{k+1} = a_{ii}^{-1}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^k - \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij}x_j^k\right], \quad i = 1, 2, \ldots, N.$$

Если вычислять компоненты последовательно, то к моменту вычисления x_i^{k+1}, значения $x_1^{k+1}, \ldots, x_{i-1}^{k+1}$ уже известны.
Подставим их в первую сумму, получим

$$x_i^{k+1} = a_{ii}^{-1}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij}x_j^k\right], \quad i = 1, 2, \ldots, N.$$

Такой процесс называется методом Зейделя.

Матричная форма метода Зейделя

Введём
нижнетреугольную матрицу L, $l_{ij} = a_{ij}$ для $j < i$, остальные нули, и
верхнетреугольную матрицу U, $u_{ij} = a_{ij}$ для $j > i$, остальные нули.
Тогда $A = D + L + U$.
Уравнение метода записывается в виде

$$x^{k+1} = D^{-1}b - D^{-1}Lx^{k+1} - D^{-1}Ux^k.$$

Перепишем в виде метода простой итерации:

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

Сходимость метода Зейделя

По теореме о сжимающем отображении:
Теорема: Метод Зейделя сходится, если $||(D+L)^{-1}U|| < 1$.
Проверять неудобно, найдём другой признак сходимости.

Матрица A положительно определена $(A > 0)$, если

$$(Ax, x) \geq \gamma(x, x), \quad \gamma > 0.$$

Если A положительно определена и симметрична, то

$$(x, y)_A = (Ax, y)$$

– скалярное произведение.
Теорема: *Если A – симметричная положительно определённая матрица, то метод Зейделя сходится.*

Лемма: *определим последовательность векторов z^k:*

$$B(z^{k+1} - z^k) + Az^k = 0.$$

Пусть $B - A/2 > 0$, $A > 0$ и симметрична. Тогда $z^k \to 0$ при $k \to \infty$.
Док-во: Представим z^k в виде

$$z^k = 0.5(z^{k+1} + z^k) - 0.5(z^{k+1} - z^k),$$

подставим в условие и получим

$$(B - 0.5A)(z^{k+1} - z^k) + 0.5A(z^{k+1} + z^k) = 0.$$

Умножим скалярно на $z^{k+1} - z^k$ (+симметричность):

$$((B - A/2)(z^{k+1} - z^k), z^{k+1} - z^k) + 0.5(||z^{k+1}||_A^2 - ||z^k||_A^2) = 0.$$

Так как $B - A/2 > 0$, то $||z^{k+1}||_A \leq ||z^k||_A$, и $||z^k||_A \geq 0$ – значит, существует конечный предел $\lim_{k\to\infty} ||z^k||_A = a$.

Тогда $((B - A/2)(z^{k+1} - z^k), z^{k+1} - z^k)$ стремится к нулю, и $z^{k+1} - z^k \to 0$. Поскольку

$$Az^k = -B(z^{k+1} - z^k), \quad z^k = -A^{-1}B(z^{k+1} - z^k),$$

A^{-1} существует из-за $A > 0$, то

$$||z^k|| \leq ||A^{-1}B|| \; ||z^{k+1} - z^k|| \to 0,$$

и $z^k \to 0$ при $k \to \infty$.

Док-во теоремы: перепишем метод Зейделя в виде

$$(D+L)(x^{k+1}-x^k)+Ax^k=b.$$

Пусть u – точное решение $Au=b$ (оно существует!). Пусть $z^k=x^k-u$, тогда

$$(D+L)(z^{k+1}-z^k)+Az^k=0.$$

Проверим положительность $D+L-A/2$.

$$D+L-A/2=D+L-(D+L+U)/2=(D+L-U)/2.$$

$$((D+L-U)x,x)=(Dx,x)+(Lx,x)-(Ux,x)=(Dx,x)=\sum_i a_{ii}x_i^2>0$$

из-за симметрии A и $A>0$.
Находимся в условиях Леммы, и z^k стремится к нулю, тогда $x^k=u+z^k$ стремится к точному решению.

Сравнение методов Якоби и Зейделя

- Области сходимости методов пересекаются, но не совпадают
- Метод Зейделя, как правило, сходится быстрее
- Метод Якоби проще реализовать в параллельных вычислениях

Метод последовательной верхней релаксации (SOR)

Модифицируем метод Зейделя:

$$x_i^{k+1} = (1-\omega)x_i^k + \frac{\omega}{a_{ii}}\left[b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij}x_j^k\right],$$

где ω – параметр релаксации.

При $\omega = 1$ – метод Зейделя.

При $0 < \omega < 1$ – может сходиться для систем, где метод Зейделя не сходится.

При $1 < \omega$ – верхняя релаксация (иногда говорят сверхрелаксация) – ускорение сходимости.

Матричная форма SOR

Перепишем уравнение в виде

$$a_{ii}x_i^{k+1} + \omega \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{k+1} = (1-\omega)a_{ii}x_i^k - \omega \sum_{j=i+1}^{N} a_{ij}x_j^k + \omega b_i.$$

В матричном виде:

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

Если $(D+\omega L)^{-1}$ существует, то

$$x^{k+1} = T_\omega x^k + \omega(D+\omega L)^{-1}b, \quad T_\omega = (D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D - \omega U].$$

Сходимость SOR

Теорема. Если A – положительно определённая матрица и $0 < \omega < 2$, то SOR метод сходится для произвольного начального вектора x^0.

Скорость сходимости метода зависит от ω.
Оптимальное значение $1 < \omega < 2$, как правило, неизвестно и подбирается экспериментально.

Упражнение 3: Решение СЛАУ методом SOR

Рассмотрим краевую задачу для PDE:

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + e^{xy}\right) u(x, y) = f(x, y),$$

$$0 \le x, y \le 1, \quad u(0, y) = u(1, y) = u(x, 0) = u(x, 1) = 0.$$

Пусть $f(x, y)$ выбрана такой, что

$$u_0(x, y) = \sin(\pi x) \sin(2\pi y)$$

– решение задачи.

Для численного решения этого уравнения может использоваться метод конечно-разностной дискретизации, аналогичный упражнению 2. Разделим интервал $[0, 1]$ по обеим координатам на $N + 1$ отрезков одинаковой длины $h = 1/(N + 1)$. В каждой точке $(x_i, y_j) = (ih, jh)$, $i, j = 1, 2, \dots N$, построим конечно-разностные аппроксимации вторых производных:

$$-\frac{\partial^2}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx -h^{-2}[u(x_{i-1}, y_j) - 2u(x_i, y_j) + u(x_{i+1}, y_j)],$$
$$-\frac{\partial^2}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx -h^{-2}[u(x_i, y_{j-1}) - 2u(x_i, y_j) + u(x_i, y_{j+1})].$$

Элементы СЛАУ

$$A\vec{u} = \vec{f},$$

матрица и вектора-функции, записывается в терминах единого индекса $k = i + (j-1)N$, $k = 1, \ldots, N \cdot N$. $(\vec{u})_k = u(x_i, y_j)$, $(\vec{f})_k = f(x_i, y_j)$.
Ненулевые элементы $A_{kk'}$ матрицы определяются следующим образом:

$$A_{kk'} = 4/h^2 + e^{x_i y_j}, \quad i = i', \ j = j',$$
$$A_{kk'} = -1/h^2, \quad |i - i'| = 1, \ j = j',$$
$$A_{kk'} = -1/h^2, \quad i = i', \ |j - j'| = 1.$$

Реализуйте метод последовательной верхней релаксации (SOR) для решения СЛАУ со сформированной матрицей.
Выберите несколько значений N из последовательности 10, 20, 50, 100, 200, 500, 1000 (в зависимости от доступной вычислительной мощности).
1) Постройте зависимость погрешности решения от номера итерации для нескольких значений N и для нескольких значений $\omega = 1, 1.3, 1.6, 1.8, 1.9$, определите скорости сходимости (показатели убывающих экспонент).
Погрешность итерационного решения $u^{(s)}$ можно вычислить, сравнивая его с точным решением u_0,

$$\varepsilon = \max_{k=1\ldots N^2} |u_k^{(s)} - (u_0)_k|.$$

Не пользуйтесь матричной формой SOR и не применяйте библиотечные функции для плотных матриц в программе!
2) Постройте зависимость оптимального значения ω (при котором наблюдается наилучшая сходимость) от N для указанного выше набора.
(Оптимальное значение нет необходимости определять очень точно, ориентируйтесь на доступные вам вычислительные ресурсы при выборе точности и максимального N.)

Литература

1. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М., *Численные методы*, М.: Бином. Лаборатория знаний, 2012. - 636 с. Параграфы 6.1, 6.3, 6.6, 6.7, 6.11.
2. Faires J.D., Burden R.L. *Numerical methods* (3ed., Thomson Brooks Cole, 2003). Глава 7.