Iteračné metódy riešenia sústavy rovníc

Vyššie uvedené metódy (GEM, LU,...) riešenia lineárnych systémov rovníc zaraďujeme medzi priame metódy. To znamená, že po konečnom počte krokov bez zaokrúhľovacích chýb dostaneme presné riešenie. Iteračné metódy sú založené na vytvorení postupnosti, od ktorej očakávame, že konverguje k hľadanému riešeniu. V každom kroku iteračnej metódy teda vytvoríme nový člen postupnosti a okrem konvergencie požadujeme, aby v sa každom kroku chyba podstatne zmenšila a aby každý krok nebol príliš drahý v zmysle zložitosti.

Ako prvé uvedieme metódy založené na myšlienke rozkladu matice

$$A = M_k - N_k, \qquad \text{k=1, 2,...}$$

Potom systém $Ax = b$ prepíšeme do tvaru

$$M_k x = N_k x + b$$

a zvolíme iterácie

$$M_k x^{(k)} = N_k x^{(k-1)} + b.$$

Potom ak M_k je regulárna, dostaneme

$$x^{(k)} = M_k^{-1} N_k x^{(k-1)} + M_k^{-1} b.$$

Označme $Q_k = M_k^{-1} N_k$ a $d^{(k)} = M_k^{-1} b$. Dostaneme tak postupnosť systémov

$$x^{(k)} = Q_k x^{(k-1)} + d^{(k)}$$

Zrejme ak postupnosť $\{x^k\}$ konverguje, tak konverguje k riešeniu systému $Ax = b$.

Ak rozklad $A = M - N$ nezávisí od k, hovoríme o stacionárnej metóde a máme

$$x^{(k)} = Q x^{(k-1)} + d$$

Na konvergenciu potrebujeme, aby odchýlka od presného riešenia sa v limite blížila k nule. Spočítajme teda

$$\begin{aligned} x^{(k)} - \bar{x} &= Q_k x^{(k-1)} + d^{(k)} - (Q_k \bar{x} + d^{(k)}) = Q_k (x^{(k-1)} - \bar{x}) && (1) \\ &= Q_k Q_{k-1} (x^{(k-1)} - \bar{x}) = \cdots = Q_k \cdots Q_1 (x^0 - \bar{x}). && (2) \end{aligned}$$

Preto postupnosť $\{x^k\}$ bude pre ľubovoľné x^0 konvergovať práve vtedy, keď

$$Q_k \cdots Q_1 \to 0$$

Ak normujeme (2) dostaneme

$$\|x^{(k)} - \bar{x}\| \leq \|Q_k\| \cdots \|Q_1\| \|(x^0 - \bar{x})\|.$$

Potom ak existuje $c < 1$ také, že $\|Q_i\| \leq c$ pre každé i, tak

$$\|x^{(k)} - \bar{x}\| \leq c^k \|(x^0 - \bar{x})\| \xrightarrow{k\to\infty} 0$$

Tým dostávame postačujúcu podmienku konvergencie

$$\|Q_k\| \leq c < 1.$$

Pre prípad stacionárnych metód samozrejme na konvergenciu stačí

$$\|Q\| < 1.$$

Avšak v prípade stacionárnych metód máme dokonca nutnú a postačujúcu podmienku konvergencie

$$\rho(Q) < 1,$$

kde $\rho(Q)$ je spektrálny polomer matice Q.

Veta. Postupnosť $x^{(k)}$ riešení systémov $x^{k(k)} = Qx^{(k-1)} + d$ konverguje k riešeniu $Ax = b$ práve vtedy, keď $\rho(Q) < 1$.

Dôkaz. Najskôr ukážeme, že pre ľubovoľné $\epsilon > 0$ a ľubovoľnú maticu R existuje operátorová norma $||\cdot||_*$ taká, že $||R||_* < \rho(R) + \epsilon$. Nech $J = S^{-1}RS$ je Jordanov kanonický tvar matice R. Označme $D_\epsilon = \mathrm{diag}(1, \epsilon, \epsilon^2, \ldots, \epsilon^{n-1})$. Potom matica $(SD_\epsilon)^{-1}R(SD_\epsilon) = D_\epsilon^{-1}JD_\epsilon$ je "Jordanova matica"s ϵ na diagonále. Definujme vektorovú normu $||x||_* = ||(SD_\epsilon)^{-1}x||_\infty$. Potom

$$\begin{aligned}
||R||_* &= \max_{x\neq 0} \frac{||Rx||_*}{||x||_*} = \max_{x\neq 0} \frac{||(SD_\epsilon)^{-1}Rx||_\infty}{||(SD_\epsilon)^{-1}x||_\infty} \\
&= \max_{y\neq 0} \frac{||(SD_\epsilon)^{-1}R(SD_\epsilon)y||_\infty}{||y||_\infty} = ||(SD_\epsilon)^{-1}R(SD_\epsilon)||_\infty \\
&= \max_i |\lambda_i| + \epsilon = \rho(R) + \epsilon.
\end{aligned}$$

Teraz dokážeme vetu. Ak $\rho(R) \geq 1$, zvoľme $x^0 - x$ vlastný vektor s vlastnou hodnotou λ takou, že $|\lambda| = \rho(R)$. Potom

$$(x^{(m+1)} - x) = R(x^{(m)} - x) = \cdots = R^{m+1}(x^{(0)} - x) = \lambda^{m+1}(x^{(0)} - x) \quad (3)$$

nekonverguje k 0.

Naopak, ak $\rho(R) < 1$, tak vieme nájsť $\epsilon > 0$, také, že $\rho(R) + \epsilon < 1$, a teda aj normu $||\cdot||*$ takú, že $||R||_* < 1$, čo zaručuje konvergenciu. Pri vytváraní matíc M, N treba brať do úvahy

- Matica M musí byť ľahko invertovateľná, prípadne systémy s maticou M sa musia dať ľahko riešiť.
- Mali by sme vedieť ľahko overiť niektorú z podmienok konvergencie, napríklad pre stacionárne metódy $\rho(M^{-1}N) < 1$.

Jacobiho metóda

Jacobiho metódu dostaneme pre rozklad

$$A = D - (D - A),$$

kde D je diagonálna matica obsahujúca diagonálu matice A, pričom o A predpokladáme, že má nenulovú diagonálu. Získame tak rekurentný vzťah

$$\begin{aligned} x^{(k)} &= D^{-1}(D - A)x^{(k-1)} + D^{-1}b = -D^{-1}(A - D)x^{(k-1)} + D^{-1}b \\ &= Q_J x^{(k-1)} + d. \end{aligned}$$

Matica Q_J má tým pádom tvar

$$Q_J = \begin{pmatrix} 0 & \frac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{11}} & 0 & \cdots & \frac{a_{1n}}{a_{11}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{a_{n1}}{a_{nn}} & \frac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}$$

Pozrime sa teraz na konvergenciu riešenia pre túto maticu v prípade jednoducho spočítateľných noriem. V prípade riadkovej normy máme

$$\|Q_J\|_\infty = \max_i \sum_{j \neq i} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|,$$

z čoho okamžite dostaneme, že ak $|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$ (hovoríme, že A má má po riadkoch prevládajúcu diagonálu), tak $\|Q_j\| < 1$.

Ak A má prevládajúcu diagonálu po stĺpcoch, tak analogicky

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

Keďže platí

$$-Q_J = D^{-1}(A - D) = D^{-1}[(A - D)D^{-1}]D,$$

tak

$$\rho(D^{-1}(A - D)) = \rho((A - D)D^{-1}) \leq \|(A - D)D^{-1}\|_1 < 1$$

Zhrnutím uvedených úvah dostávame, že ak A má prevládajúcu diagonálu (po riadkoch alebo po stĺpcoch) tak Jacobiho metóda konverguje.

Gaussova-Seidlova metóda

Pri rozklade matice A na tvar

$$A = D + L + U,$$

kde D je diagonálna matica, L je striktne dolná trojuholníková (t.j. dolná trojuholníková s nulami na diagonále) a U je striktne horná trojuholníková, voľbou

$$M = D + L, \qquad\qquad N = -U$$

získame iteračnú rovnicu

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

Ukazuje sa, že ako postačujúca podmienka konvergencia Gaussovej-Seidlovej metódy je diagonálna dominancia rovnako dobrá ako v prípade Jacobiho metódy.

Veta 1. *Ak matica A má prevládajúcu diagonálu po riadkoch alebo stĺpcoch, tak Gaussova-Seidlova metóda konverguje*

Dôkaz: Predpokladajme riadkovú diagonálnu dominanciu matice $A = (a_{ij})$. Označme

$$c = \max_i \sum_{j \neq i} \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|}.$$

Zrejme $c < 1$, lebo podľa predpokladu A má prevládajúcu diagonálu po riadkoch. Označme

$$Q_{GS} = (D + L)^{-1} U.$$

Potrebujeme ukázať, že $\|Q_{GS}\|_\infty < c$.

Nech x je vektor s vlastnosťou $\|x\|_\infty = 1$. Potom stačí ukázať, že

$$\|Q_{GS} x\|_\infty < c.$$

Označme $y = Q_{GS} x = (D + L)^{-1} U x$, čo vieme prepísať na tvar $(D + L) y = -Ux$, čiže

$$\begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & \cdots & -a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & -a_{n-1\,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

Tento tvar naznačuje možnosť pokračovať indukciou.

V prvom kroku dostávame

$$|y_1| \leq \sum_{j=2}^{n} \frac{|a_{ij}||x_j|}{|a_{11}|} \leq \sum_{j=2}^{n} \frac{|a_{ij}|}{|a_{11}|} \max_k |x_k| = \sum_{j=2}^{n} \frac{|a_{ij}|}{|a_{11}|} \|x_k\|_\infty = \sum_{j=2}^{n} \frac{|a_{ij}|}{|a_{11}|} \leq c.$$

Predpokladajme, že $|y_k| \leq c$ pre $k = 1, \ldots, i-1$. Potom

$$|y_i| \leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}||y_j| + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}||x_j| \right)$$

V prvej sume v zátvorke môžeme použiť indukčný predpoklad a v druhej vlastnosť $\|x\|_\infty = 1$, z ktorej dostávame $|x_j| \leq 1$ pre každé $j = 1, \ldots, n$. Teda máme nerovnosť

$$|y_i| \leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| c + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}| \right)$$

a keďže $c < 1$,

$$|y_i| \leq \frac{1}{|a_{ii}|} \left(\sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}| \right) = \sum_{j \neq i} \frac{|a_{ij}|}{a_{ii}} \leq c.$$

Takže $|y_i| < c$ pre každé $i = 1, \ldots, n$ a teda aj $\|Q_{GS}x\|_\infty = \|y\|_\infty = \max_i |y_i| < c$.

Za predpokladu stĺpcovej dominancie matice A dostaneme podobne ako pri Jacobiho metóde

$$\begin{aligned} \rho((D+L)^{-1}U) = \rho(U(D+L)^{-1}) &\leq \|U(D+L)^{-1}\|_1 \\ &= \|(D+L)^{-T}U^T\|_\infty = \|Q_{GS}^T\|. \end{aligned}$$

Keďže stĺpcová dominancia v A znamená riadkovú dominanciu v A^T, použitím časti dôkazu pre riadkovú dominanciu dostávame $\|Q_{GS}^T\| < c^T$, kde $c^T = \max_j \sum_{j \neq i} \frac{|a_{ij}|}{|a_{jj}|}$

Pre istú triedu matíc však máme konvergenciu zaručenú vždy.

Veta 2. *Ak A je symetrická kladne definitná matica, tak Gaussova-Seidlova metóda konverguje.*

Dôkaz: Pre prípad symetrickej matice dostávame rozklad

$$A = D + L + L^T,$$

kde D je diagonálna matica obsahujúca diagonálne prvky matice A a L a L^T sú zvyšné dolné a horné trojuholníkové časti matice $A - D$. Keďže A je kladne definitná, diagonála matice D obsahuje len kladné prvky, a teda je tiež kladne definitná (ak by $a_{ii}<0$, tak $e_i^T A e_i = a_{ii} < 0$, kde $e_i = (0, \ldots, 1, \ldots, 0)$ je vektor kanonickej bázy).

Na odhad pre konvergenciu použijeme 2-normu, čím zredukujeme problém na odhad veľkosti absolútnych hodnôt vlastných čísel, keďže pre symetrickú maticu A je $\|A\|_2 = |\lambda|_{\max}$. Najskôr zjednodušíme maticu $Q_{GS} = -(D + L)^{-1}L^T$.

$$Q_{GS} = -(D+L)^{-1}L^T = -D^{-\frac{1}{2}}(I + D^{-\frac{1}{2}}LD^{-\frac{1}{2}})^{-1}D^{-\frac{1}{2}}L^T D^{-\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}.$$

Označme $L_1 = D^{-\frac{1}{2}}LD^{-\frac{1}{2}}$. Potom

$$Q_{GS} = -D^{-\frac{1}{2}}(I + L_1)^{-1}L_1^T D^{\frac{1}{2}}.$$

Matica $-(I + L_1)^{-1}L_1^T$ je teda podobná s maticou Q_{GS}, a tým pádom má rovnaké vlastné čísla.

Ak x označuje jednotkový vlastný vektor, t.j. $\|x\|_2 = \sqrt{x^*x} = 1$ a $-(I + L_1)^{-1}L_1^T x = \lambda x$ (x môže byť komplexný vektor a λ komplexná vlastná hodnota, * je znamená hermitovské združenie), máme

$$\begin{aligned} -(I + L_1)^{-1}L_1^T x &= \lambda x \\ -L_1^T x &= \lambda(I + L_1)x \end{aligned}$$

a prenásobením posledného vzťahu zľava x^* a úpravou

$$-x^*L_1^T x = \lambda x^*(I + L_1)x = \lambda(I + x^*L_1 x).$$

Označme $z = x^*L_1^T x$. Potom platí

$$\begin{aligned} -z &= \lambda(1 + \bar{z}) \\ \lambda &= -\frac{z}{1 + \bar{z}}. \end{aligned}$$

Z toho dostaneme, že

$$|\lambda|^2 = \lambda\bar{\lambda} = \frac{z}{1 + \bar{z}} \cdot \frac{\bar{z}}{1 + z} = \frac{|z|^2}{1 + z + \bar{z} + |z|^2}$$

a navyše

$$\begin{aligned}1 + z + \bar{z} = 1 + x^* L_1^T x + x^* L_1 x &= x^*(I + L_1 + L_1^T)x \\ &= x^* D^{-\frac{1}{2}}(D + L + L^T)D^{-\frac{1}{2}} \\ &= x^* D^{-\frac{1}{2}} A D^{-\frac{1}{2}} x > 0.\end{aligned}$$

Preto

$$|\lambda|^2 = \frac{|z|^2}{1 + z + \bar{z} + |z|^2} < 1,$$

a teda aj $\|Q\|_2 = |\lambda|_{\max} < 1$.

Poznámka: Ak sa na výpočet Jacobiho metódou pozrieme po súradniciach uvidíme, že j-ta súradnica riešenia v x^m sa spočíta ako

$$x_j^{(m)} = \frac{1}{a_{jj}}(b_j - \sum_{k \neq j} a_{jk} x_k^{(m-1)}). \tag{4}$$

To ale znamená, že v čase, keď počítame $x_j^{(m)}$ už poznáme $x_l^{(m)}$ pre $l < j$, čo sú súradnice zlepšeného riešenia. Ak tieto nové súradnice použijeme vo výpočte (4), t.j. rozdelíme sumu v zátvorke na $k < j$ a $k > j$ a v $k < j$ nahradíme $x_k^{(m-1)}$ novými súradnicami $x_k^{(m)}$, dostaneme

$$x_j^{(m)} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{k<j} a_{jk} x_k^{(m)} - \sum_{k>j} a_{jk} x_k^{(m-1)} \right),$$

čo nie je ale nič iné ako Gaussova-Seidelova metóda. Ako si možno všimnúť

v prípade že niektorý prvok diagonály matice A je nulový, metódy zlyhajú (delenie prvkom a_{ii}). Tento problém možno obísť výmenou riadkov alebo stĺpcov, avšak za cenu straty istoty konvergencie.

Ak by sme chceli všeobecný prípad $Ax = b$ previesť na symetrický $A^T Ax = A^T b$, môže sa stať, že $A^T A$ je zle podmienená ($c_2(A^T A) = c_2(A)^2$).