Numerické metody
9. přednáška, 15. dubna 2015

Jiří Zelinka

Iterační metody řešení systémů lineárních rovnic

Systém

$$Ax = \boldsymbol{b}$$

převedeme na

$$\boldsymbol{x} = T\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}$$

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = T\boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{g}, \qquad k = 0, 1, \ldots$$

Hlavní věta o konvergenci iteračního procesu

Posloupnost $\{\boldsymbol{x}^k\}_{k=0}^{\infty}$ určená iteračním procesem $\boldsymbol{x} = T\boldsymbol{x} + \boldsymbol{g}$ konverguje pro každou počáteční aproximaci $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ právě tehdy, když $\rho(T) < 1$, přičemž

$$\lim_{k \to \infty} \boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{x}^*, \; \boldsymbol{x}^* = T\boldsymbol{x}^* + \boldsymbol{g}$$

Jacobiova iterační metoda

$$A\mathbf{x} = \mathbf{b}, \qquad A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & & & a_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Matici A zapišme ve tvaru

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

kde

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & a_{nn} \end{pmatrix},$$

$$
L = \begin{pmatrix} 0 & & & 0 \\ -a_{21} & \ddots & & \\ \vdots & \ddots & \ddots & \\ -a_{n1} & \cdots & -a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix},
$$

$$
U = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \cdots & -a_{1n} \\ & \ddots & \ddots & \vdots \\ & & \ddots & -a_{n-1,n} \\ 0 & & & 0 \end{pmatrix}.
$$

D je diagonální matice, L je dolní trojúhelníková matice s nulami na diagonále a U je horní trojúhelníková matice s nulami na diagonále.

$$Ax = (D - L - U)x = \boldsymbol{b}$$
$$Dx = (L + U)x + \boldsymbol{b}.$$

Pokud $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \ldots, n$, je matice D regulární a z předchozí rovnice lze vypočítat

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

$$D^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix},$$

Maticový tvar Jacobiovy iterační metody

Jacobiova iterační matice: $T_J = D^{-1}(L+U)$

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = T_J \boldsymbol{x}^k + D^{-1}\boldsymbol{b},$$

$T_J = (t_{ij})$, $t_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}$ pro $i \neq j$, $t_{ii} = 0$ pro $i = 1, \dots, n$.

$$T_J = \begin{pmatrix} 0 & -\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & \cdots & -\dfrac{a_{1n}}{a_{11}} \\ -\dfrac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & & -\dfrac{a_{2n}}{a_{22}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -\dfrac{a_{n1}}{a_{nn}} & -\dfrac{a_{n2}}{a_{nn}} & \cdots & 0 \end{pmatrix}, \quad D^{-1}\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} \dfrac{b_1}{a_{11}} \\ \dfrac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \dfrac{b_n}{a_{nn}} \end{pmatrix}.$$

Realizace výpočtu:

Z první rovnice vypočteme x_1:

$$a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n = b_1 \Rightarrow x_1 = \frac{1}{a_{11}}(b_1-a_{12}x_2-\ldots-a_{1n}x_n)$$

$$x_1^{k+1} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^k - \ldots - a_{1n}x_n^k),$$

z druhé rovnice vypočteme x_2:

$$x_2^{k+1} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^k - a_{23}x_3^k - \ldots - a_{1n}x_n^k),$$

obecně z i-té rovnice vypočteme x_i:

$$x_i^{k+1} = -\sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} \frac{a_{ij}}{a_{ii}}x_j^k + \frac{b_i}{a_{ii}},$$

až z n-té rovnice vypočteme x_n, a na pravé straně takto získaného systému jsou prvky matice T_J.

Věta o konvergenci Jacobiovy iterační metody:
Posloupnost $\{x^k\}_{k=0}^{\infty}$ generovaná metodou $x^{k+1} = T_J x^k + D^{-1}\boldsymbol{b}$ konverguje pro každou počáteční aproximaci $x^0 \in \mathbb{R}^n$ právě tehdy, když $\varrho(T_J) < 1$.

Odhad chyby:

$$\|x^* - x^k\|_\infty \leq \frac{\|T_J\|_\infty^k}{1 - \|T\|_\infty}\|x^1 - x^0\|_\infty.$$

Silné řádkové sumační kriterium:

Nechť matice A je ryze řádkově diagonálně dominantní, tj.

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} |a_{ij}|, \qquad i = 1, \ldots, n.$$

Pak Jacobiova iterační metoda konverguje pro každou počáteční aproximaci $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{R}^n$.

Silné sloupcové sumační kriterium:

Nechť matice A je ryze sloupcově diagonálně dominantní, tj.

$$|a_{kk}| > \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^{n} |a_{ik}|, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Pak Jacobiova iterační metoda konverguje pro každou počáteční aproximaci $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{R}^n$.

Gaussova-Seidelova iterační metoda

Z první rovnice vypočteme x_1:

$$a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n = b_1 \Rightarrow x_1 = \frac{1}{a_{11}}(b_1-a_{12}x_2-\ldots-a_{1n}x_n)$$

$$x_1^{k+1} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^k - \ldots - a_{1n}x_n^k),$$

z druhé rovnice vypočteme x_2, pro x_1 použijme novou iteraci:

$$x_2^{k+1} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{k+1} - a_{23}x_3^k - \ldots - a_{1n}x_n^k),$$

ze třetí rovnice vypočteme x_3, pro x_1 a x_2 použijme novou iteraci:

$$x_3^{k+1} = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^{k+1} - a_{32}x_2^{k+1} - a_{34}x_4^k \ldots - a_{1n}x_n^k),$$

Obecně

$$x_i^{k+1} = -\sum_{j=1}^{i-1} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^{k} + \frac{b_i}{a_{ii}}, \qquad i = 1, \dots, n.$$

Maticový zápis:

$$A\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \begin{aligned} (D - L - U)\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{b} \\ (D - L)\boldsymbol{x} &= U\boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}. \end{aligned}$$

$a_{ii} \neq 0,\ i = 1, \dots, n, \quad \Rightarrow$ matice $D - L$ je regulární a

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

Položme $T_G = (D - L)^{-1} U$, Gaussova-Seidelova iterační metoda je tvaru

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = T_G \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{g}, \qquad \boldsymbol{g} = (D - L)^{-1}\boldsymbol{b}.$$

Věta

Posloupnost $\{x^k\}_{k=0}^{\infty}$ generovaná Gaussovou-Seidelovou iterační metodou $x^{k+1} = (D-L)^{-1}Ux^k + (D-L)^{-1}\boldsymbol{b}$. konverguje pro každou počáteční aproximaci $x^0 \in \mathbb{R}^n$ právě tehdy, když $\varrho(T_G) < 1$.

Silné řádkové sumační kriterium:

Nechť matice A je ryze řádkově diagonálně dominantní, tj.

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|, \qquad i = 1, \dots, n.$$

Pak Gaussova-Seidelova iterační metoda konverguje pro každou počáteční aproximaci $x^0 \in \mathbb{R}^n$.

Silné sloupcové sumační kriterium:

Nechť matice A je ryze sloupcově diagonálně dominantní, tj.

$$|a_{kk}| > \sum_{\substack{i=1 \\ i \neq k}}^{n} |a_{ik}|, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Pak Gaussova-Seidelova iterační metoda konverguje pro každou počáteční aproximaci $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{R}^n$.

Příklad

Geometrický význam

Věta (Stein-Rosenberg)

Nechť pro prvky matice A platí $a_{ij} \leq 0$ pro všechna $i \neq j$ a $a_{ii} > 0$, $i = 1, \ldots, n$. Pak platí právě jedno z následujících tvrzení:

- $0 < \varrho(T_G) < \varrho(T_J) < 1$
- $1 < \varrho(T_J) < \varrho(T_G)$
- $\varrho(T_J) = \varrho(T_G) = 0$
- $\varrho(T_J) = \varrho(T_G) = 1.$

To znamená, že konvergují-li obě metody, Gaussova-Seidelova metoda konverguje rychleji.

Věta

Nechť A je pozitivně definitní matice. Pak Gaussova-Seidelova metoda konverguje pro každou počáteční aproximaci.

Relaxační metody

Modifikace Gaussovy–Seidelovy metody, ω – relaxační parametr

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

Relaxační metodu lze maticově zapsat takto

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

$$T_\omega = (D-\omega L)^{-1}[(1-\omega)D + \omega U]$$

Hodnoty parametru ω:

Pro	$0 < \omega < 1$	se iterační metody nazývají **metodami dolní relaxace**. Tyto metody jsou vhodné v případě, že Gaussova-Seidelova metoda nekonverguje.
Pro	$\omega = 1$	je relaxační metoda totožná s Gaussovou-Seidelovou metodou.
Pro	$1 < \omega$	se metody nazývají **metodami horní relaxace**, nebo častěji SOR metodami (SOR = Successive Over-Relaxation). Tyto metody lze užít ke zrychlení konvergence Gaussovy-Seidelovy metody.

Věta (Kahan).

Nechť $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \ldots, n$. Pak

$$\varrho(T_\omega) \geq |\omega - 1|.$$

Důsledek: Má smysl uvažovat jen $\omega \in (0, 2)$.

Věta (Ostrowski-Reich).

Pro pozitivně definitní matici A platí $\varrho(T_\omega) < 1$ pro všechna $\omega \in (0, 2)$.

Třídiagonální matice:

$$A = (a_{ij})_{i,j=1}^n, \qquad a_{ij} = 0, \text{ pro } |i - j| > 1$$

Věta.

Nechť A je třídiagonální pozitivně definitní matice. Pak $\varrho(T_G) = \varrho^2(T_J) < 1$ a optimální hodnota relaxačního parametru je dána vztahem

$$\omega = \omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \varrho^2(T_J)}}.$$

Při této volbě je $\varrho(T_\omega) = |1 - \omega|$.

Například pro systémy

$$
\begin{aligned}
x_1 + kx_2 &= b_1 \\
x_1 - kx_2 &= b_2
\end{aligned}
$$

Jacobiova metoda: cyklus délky 4
Gaussova–Seidelova metoda: cyklus délky 2

Relaxační metody: cykly různých délek

$$
\begin{aligned}
x_1 + x_2 &= 1 \\
qx_1 + x_2 &= 1.
\end{aligned}
$$

Pro $\omega = 2$:

$$
T_2 = \begin{pmatrix} -1 & -2 \\ 2q & 4q-1 \end{pmatrix}, \quad \lambda_{1,2} = \cos\varphi \pm i \sin\varphi, \quad q = \frac{1}{2}(1+\cos\varphi)
$$

$\varphi = 2\pi l/p$, $0 < l < p/2 \Rightarrow$ existuje cyklus délky p.

Body cyklu leží na elipse se středem v hledaném řešení.

Iterační metody pro systémy nelineárních rovnic

$$
\begin{aligned}
f_1(x_1, \dots, x_m) &= 0 \\
&\vdots \\
f_m(x_1, \dots, x_m) &= 0
\end{aligned}
$$

Kořen systému: uspořádaná m-tice reálných čísel

$$\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \dots, \xi_m),$$

která tomuto systému vyhovuje.

Vektorový tvar:

$$F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{o}, \qquad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m, \boldsymbol{o} = (0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^m.$$

Systém převedeme na ekvivalentní rovnici

$$\boldsymbol{x} = G(\boldsymbol{x}), \qquad \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$$

neboli

$$\begin{aligned} x_1 &= g_1(x_1, \dots, x_m) \\ &\vdots \\ x_m &= g_m(x_1, \dots, x_m) \end{aligned}$$

a budeme hledat pevný bod zobrazení $G : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$.

Definujme nyní v prostoru $\mathbb{R}^m$ metriku:

$$\varrho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}) = \max_{1 \le i \le m} |x_i - y_i|.$$

Prostor $\mathbb{R}^m$ s takto definovanou metrikou je úplným metrickým prostorem. Nyní lze pro vyšetřování konvergence iteračního procesu $\boldsymbol{x}^{k+1} = G(\boldsymbol{x}^k), k = 0, 1, 2, \dots$ užít Banachovy věty o pevném bodě.

Věta

Nechť zobrazení $G : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^m$ je kontrakce na $\mathbb{R}^m$,

$$\varrho(G(\boldsymbol{x}), G(\boldsymbol{y})) \le q\varrho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}), \qquad 0 \le q < 1.$$

Pak pro každou počáteční aproximaci $\boldsymbol{x}^0 \in \mathbb{R}^m$ je posloupnost $\left\{\boldsymbol{x}^k\right\}_{k=0}^{\infty}$, $k = 0, 1, 2, \ldots$, $\boldsymbol{x}^k = G(\boldsymbol{x}^{k-1})$, konvergentní v $\mathbb{R}^m$ a $\lim\limits_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{\xi}$, kde $\boldsymbol{\xi}$ je jediný pevný bod zobrazení G.

Věta

Nechť $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^m$ je pevný bod rovnice $\boldsymbol{x} = G(\boldsymbol{x})$. Nechť funkce $g_i, i = 1, \ldots, m$, mají spojité parciální derivace pro všechna $\boldsymbol{x} \in \Omega(\boldsymbol{\xi}, r)$, $\Omega(\boldsymbol{\xi}, r) = \{\boldsymbol{x} | \varrho(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\xi}) \le r\}$. Nechť dále platí

$$\left|\frac{\partial g_i(\boldsymbol{x})}{\partial x_j}\right| \le \frac{q}{m}, \qquad i, j = 1, \ldots, m,$$

$0 \le q < 1$ a nechť $\boldsymbol{x}^0 \in \Omega(\boldsymbol{\xi}, r)$. Pak všechny iterace $\left\{\boldsymbol{x}^k\right\}_{k=0}^{\infty}$ určené vztahem $\boldsymbol{x}^{k+1} = G(\boldsymbol{x}^k)$ leží v množině $\Omega(\boldsymbol{\xi}, r)$ a $\lim\limits_{k\to\infty} \boldsymbol{x}^k = \boldsymbol{\xi}$.

Jednodušší předpoklad:

$$\max_{1\le i \le m} \sum_{j=1}^{m} \left| \frac{\partial g_i(x)}{\partial x_j} \right| \le q < 1.$$

Seidelova matoda

Pro výpočet x_i^{k+1} použijeme již vypočtených hodnot $x_1^{k+1}, \dots,$ x_{i-1}^{k+1}, tj.

$$\begin{aligned}
x_1^{k+1} &= g_1(x_1^k, x_2^k, \dots, x_m^k) \\
x_2^{k+1} &= g_2(x_1^{k+1}, x_2^k, \dots, x_m^k) \\
x_3^{k+1} &= g_3(x_1^{k+1}, x_2^{k+1}, \dots, x_m^k) \\
&\vdots \\
x_m^{k+1} &= g_m(x_1^{k+1}, \dots, x_{m-1}^{k+1}, x_m^k).
\end{aligned}$$

Newtonova metoda pro systémy nelineárních rovnic

$$F(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{o}, \qquad F \in C^2(O(\boldsymbol{\xi}))$$

$$J_F(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dots & \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_m} \end{pmatrix}$$

Taylorův rozvoj:

$$F(\boldsymbol{x}+h) = F(\boldsymbol{x}) + J_F(\boldsymbol{x}) \cdot \boldsymbol{h} + O(\|\boldsymbol{h}\|^2) \cdot (1, \dots, 1)^T$$

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^k,\ \boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{h} \Rightarrow \boldsymbol{h} = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k$$

Zanedbáme chybový člen,
$F(\boldsymbol{x}+h) = \boldsymbol{o} \Rightarrow J_F(\boldsymbol{x}^k)(\boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k) = -F(\boldsymbol{x}^k)$

$$x^{k+1} = x^k - J_F^{-1}(x^k)F(x^k)$$

Iterační funkce

$$G(x) = x - J_F^{-1}(x)F(x)$$

Věta

Nechť $\boldsymbol{\xi}$ je kořenem rovnice $F(x) = \boldsymbol{o}$. Nechť $J_F(x)$ je regulární matice se spojitými prvky v okolí $O(\boldsymbol{\xi})$ bodu $\boldsymbol{\xi}$, přičemž

$$\left\| J_F^{-1}(x) \right\|_\infty \leq K, \qquad K = \mathrm{konst.},$$

pro všechna x z tohoto okolí. Nechť funkce $f_i, i = 1, \ldots, m$, mají spojité druhé parciální derivace v $O(\boldsymbol{\xi})$.
Posloupnost $\left\{x^k\right\}_{k=0}^{\infty}$ určená Newtonovou metodou konverguje ke kořenu $\boldsymbol{\xi}$ za předpokladu, že počáteční aproximace x^0 leží dostatečně blízko $\boldsymbol{\xi}$. Řád metody je roven dvěma.