Ćwiczenia z Metod Numerycznych II A
rok akademicki 2001/2002

seria 3

Jakub Narębski Tomasz Pawłowski

13 marca 2002 roku

1 Metody iteracyjne dla układu równań liniowych

1.1 Iteracyjne poprawianie rozwiązania

Rozwiązanie układu równań $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ którąś z metod dokładnych (np. metodą Gaussa) zazwyczaj obarczone jest pewnym błędem. Błąd ten możemy oszacować *a posteriori* obliczając tzw. **wektor reszt**

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}\,\mathbf{x} - \mathbf{b}. \tag{1.1.1}$$

Uwaga: wektor (jego składowe) ten należy obliczać ze zwiększoną dokładnością, np. w arytmetyce podwójnej precyzji, gdyż w przeciwnym przypdaku możemy błędnie wnioskować o tym, czy otrzymane rozwiązanie spełnia układ równań, czy też nie.

Załóżmy, że dokładny wynik $\hat{\mathbf{x}}$ różni się od otrzymanego o małą poprawkę: $\hat{\mathbf{x}} = \mathbf{x} - \delta\mathbf{x}$. Łatwo zauważyć, że $\delta\mathbf{x}$ spełnia równanie

$$\mathbf{A}\,\delta\mathbf{x} = \mathbf{A}\,\mathbf{x} - \mathbf{b} = \mathbf{r}. \tag{1.1.2}$$

Możemy zatem obliczyć $\delta\mathbf{x}$ rozwiązując powyższe równanie. Oczywiście wynik znów będzie opatrzony pewnym błędem, tak więc $\mathbf{x} - \delta\mathbf{x}$ nie będzie ścisłym rozwiązaniem, a pewnym (lepszym niż $\mathbf{x}$) jego przybliżeniem.

Z powyższych uwag wynika następujący przepis na **iteracyjne poprawianie rozwiązania** układu równań liniowych:

1. Obliczamy wektor reszt $\mathbf{r}^{(i)} = \mathbf{A}\,\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{b}$.
2. Sprawdzamy warunek stopu.
3. Obliczamy poprawkę $\delta\mathbf{x}^{(i)}$ rozwiązując układ równań $\mathbf{A}\,\delta\mathbf{x}^{(i)} = \mathbf{r}^{(i)}$.
4. Jako następne przybliżenie rozwiązania bierzemy $\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} - \delta\mathbf{x}^{(i)}$.

Jako warunek stopu możemy przyjąć $\|\mathbf{r}^{(i)}\|_2 < \varepsilon$, lub $\|\mathbf{r}^{(i)}\|_\infty < \varepsilon\|\mathbf{A}\,\mathbf{x}^{(i)}\|_\infty$, albo $\|\mathbf{r}^{(i)}\|_\infty < \varepsilon\|\mathbf{b}\|_\infty$, (o ile $\mathbf{x}^{(i)}$ jest dostatecznie bliski rozwiązania). Norma wektorowa $\|\bullet\|_\infty$ zdefiniowana jest wzorem $\|\mathbf{b}\|_\infty = \max(|b_1|, |b_2|, \ldots, |b_n|)$.

1.2 Metody iteracyjne rozwiązujące $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ oparte na podziale macierzy

W wielu przypadkach pojawia się potrzeba rozwiązywania wielkich układów równań z macierzą *rzadką* tzn. o liczbie elementów niezerowych $\mathcal{O}(n)$. Klasyczne metody bezpośrednie (np. metoda Gaussa) zazwyczaj niszczą własność rzadkości, co powoduje zwiększone zapotrzebowanie na pamięć. Działają w czasie $\mathcal{O}(n^3)$ co jest zbyt kosztowne. Jeśli macierz rzadka ma szczególną postać to można użyć odpowiedniego algorytmu.

Innym sposobem rozwiązywania układu równań liniowych jest zastosowanie metody iteracyjnej. Wymagają one w każdym kroku ilości operacji proporcjonalnej do kosztu obliczenia $\mathbf{A}\,\mathbf{x}$, dla macierzy rzadkich równemu $\mathcal{O}(n)$. Metody te nadają się także do wyznaczenia rozwiązania z zadaną niewielką dokładnością niewielkim kosztem.

Najprostszym rodzajem metod iteracyjnych są metody oparte na podziale macierzy

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}. \tag{1.2.1}$$

Rozwiązanie układu $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ jest punktem stałym $\mathbf{M}\,\mathbf{x} = \mathbf{N}\,\mathbf{x} + \mathbf{b}$. Punkt stały możemy znaleźć za pomocą *iteracji prostej*

$$\mathbf{M}\,\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{N}\,\mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b}. \tag{1.2.2}$$

Podział macierzy (1.2.1) trzeba tak wybrać, by macierz $\mathbf{M}$ była nieosobliwa i by układ równań z tą macierzą było łatwo rozwiązywać. Ponadto aby metoda iteracji prostej była zbieżna każda wartość własna macierzy $\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ powinna być co do modułu mniejsza od jedności (promień spektralny tej macierzy powinien być mniejszy od jedności $\varrho(\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}) < 1$).

1.2.1 Metoda Richardsona

Najprostszą metodą iteracyjną jest **metoda Richardsona** określona wzorem

$$\mathbf{x}^{(i+1)} = \mathbf{x}^{(i)} - \tau(\mathbf{A}\mathbf{x}^{(i)} - \mathbf{b}). \tag{1.2.3}$$

Aby ta metoda była zbieżna wszystkie wartości własne macierzy $\mathbf{A}$ muszą być tego samego znaku. Zachodzi to np. dla macierzy symetrycznych dodatnio określonych.

Niech $\mathbf{A} = \mathbf{A}^T > 0$. Oznaczmy przez $\lambda_{\min}$ najmniejszą, a przez $\lambda_{\max}$ największą wartość własną macierzy $\mathbf{A}$: $0 < \lambda_{\min} \leq \lambda_{\max}$. Metoda Richardsona jest zbieżna gdy $0 < \tau < 2/\lambda_{\max}$. Najszybszą zbieżność osiągniemy dla

$$\tau_{\text{opt}} = \frac{2}{\lambda_{\min} + \lambda_{\max}}. \tag{1.2.4}$$

1.2.2 Metoda Jacobiego

Przedstawmy macierz $\mathbf{A}$ wyjściowego układu $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ w postaci

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}, \tag{1.2.5}$$

gdzie $\mathbf{L}$ jest macierzą poddiagonalną, $\mathbf{D}$ jest macierzą diagonalną zaś $\mathbf{U}$ macierzą naddiagonalną. W metodzie Jacobiego zakłada się, że macierz $\mathbf{D}$ jest odwracalna tzn. ma wszyskie elementy na diagonali niezerowe. Można to uzyskać zamieniając miejscami wiersze macierzy $\mathbf{A}$ (podobnie jak w metodzie Gaussa z częściowym wyborem elementu podstawowego). Jeśli takich zamian nie trzeba dokonywać to $\mathbf{D} = \mathrm{diag}(a_{ii})$, $\mathbf{L} = (a_{ij})_{i>j}$, zaś $\mathbf{U} = (a_{ij})_{i<j}$.

Metoda ta zadana jest **wzorem Jacobiego**:

$$\mathbf{D}\,\mathbf{x}^{(i+1)} = -(\mathbf{L}+\mathbf{U})\,\mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b}. \tag{1.2.6}$$

Macierz odwrotna do macierzy $\mathbf{D}$ dana jest wzorem

$$\mathbf{D}^{-1} = \mathrm{diag}(a_{ii}^{-1}). \tag{1.2.7}$$

Warunkiem dostatecznym zbieżności tej metody jest by macierz $\mathbf{A}$ (ewentualnie z przestawionymi wierszami) była *silnie diagonalnie dominująca* lub *symetryczna dodatnio określona.*

1.2.3 Metoda Gaussa–Seidla

Przedstawmy macierz $\mathbf{A}$ wyjściowego układu $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$ w postaci

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}. \tag{1.2.8}$$

Metoda Gaussa–Seidla zadana jest wzorem:

$$(\mathbf{L}+\mathbf{D})\,\mathbf{x}^{(i+1)} = -\mathbf{U}\,\mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b}. \tag{1.2.9}$$

Należy zauważyć, że macierz $(\mathbf{L}+\mathbf{U})$ jest macierzą trójkatną górną. Układ równań z taka macierzą możemy rozwiązać w czasie $\mathcal{O}(n^2)$ czyli takim jak mnożenie macierzy przez wektor.

Warunkiem koniecznym zbieżności tej metody jest by macierz $\mathbf{A}$ (ewentualnie z przestawionymi wierszami) była *diagonalnie dominująca* lub *symetryczna dodatnio określona.* Metoda Gaussa–Seidla jest zazwyczaj szybciej zbieżna niż metoda Jacobiego.

1.2.4 Metoda SOR

Metodę Gaussa–Seidla można przyspieszyć mnożąc poprawkę przez odpowiednio dobraną liczbę ω. Można to sprowadzić do wzoru:

$$(\omega\mathbf{L}+\mathbf{D})\,\mathbf{x}^{(i+1)} = (1-\omega)\mathbf{D}\,\mathbf{x}^{(i)} - \omega\mathbf{U}\,\mathbf{x}^{(i)} + \mathbf{b}. \tag{1.2.10}$$

Dla $\omega > 1$ metoda ta nosi nazwę **metody kolejnych nadrelaksacji** (w skrócie SOR, od ang. succesive overrelaxation). Optymalną wartością parametru ω dla macierzy $\mathbf{A}$ symetrycznej, dodatnio określonej i mającej własność A jest

$$\omega_{\mathrm{opt}} = \frac{2}{1+\sqrt{1-\lambda_{\max}^2}}, \tag{1.2.11}$$

gdzie $\lambda_{\max}$ jest największą co do modułu wartością własną $\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U})$. Aby metoda była zbieżna dla kazdych wartości parametrów początkowych musi zachodzić $0 < \omega < 2$.

2 Uzupełnienie zadania domowego

Napisać funkcję dokonującą jednego kroku iteracyjnego poprawienia rozwiązania równania $\mathbf{A}\,\mathbf{x} = \mathbf{b}$, funkcję poprawiającą uzyskane rozwiązanie tego równania do osiągnięcia zadanej dokładności (lub przekroczenia zadanej maksymalnej ilości iteracji). Funkcja jako argumenty może przyjmować macierz $\mathbf{A}$, jej rozkład $\mathbf{LU}$, wektor $\mathbf{b}$ oraz wektor $\mathbf{x}$ zawierający początkowe przybliżenie. Funkcje mogą nadpisywać wektor $\mathbf{x}$. Jeśli funkcja potrzebuje dodatkowego wektora pomocniczego można go przekazać jako parametr. Jako warunek stopu można przyjąć

$$\|\mathbf{r}\| < \varepsilon_{\mathrm{abs}} + \varepsilon_{\mathrm{rel}} \|\mathbf{A}\,\mathbf{x}\|. \tag{2.0.12}$$

Napisane funkcje przetestować za pomocą programu korzystającego z rozkładu $\mathbf{LU}$ macierzy do rozwiązywania układu równań (zadanie 2) oraz powyższych funkcji do poprawiania rozwiązania. *Uwaga:* jeśli funkcja dokonująca rozkładu $\mathbf{LU}$ nadpisuje macierz $\mathbf{A}$ należy najpierw zrobić kopię macierzy do wykorzystania w metodach poprawiających rozwiązanie.

Przygotował: Jakub Narębski