Iterační metody řešení soustav lineárních rovnic

Matice je:

- **diagonálně dominantní** právě tehdy, když $|a_{ii}| > \sum_{j=1,\ j\neq i}^{n} |a_{ij}|$
- **pozitivně definitní** (symetrická matice) právě tehdy, když pro $\forall \vec{x} \neq \vec{0}$ platí $(\vec{x}, \boldsymbol{A}\vec{x}) > 0$.

Tyto vlastnosti budou důležité pro zaručení konvergence iteračních metod.

Postup:

- zvolí odhad řešení $\vec{x}^{(0)}$ (pokud odhad neznáme tak libovolné číslo)
- předpokládáme $\vec{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B_k} \vec{x}^{(k)} + \vec{c}_k$
- pro správné řešení musí platit $\vec{x} = \boldsymbol{B_k}\vec{x} + \vec{c}_k$, tedy $\vec{x}^{(k+1)} - \vec{x} = \boldsymbol{B_k}(\vec{x}^{(k)} - \vec{x}) = \boldsymbol{B_k}\boldsymbol{B_{k-1}}(\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}) = \boldsymbol{B_k}\ldots\boldsymbol{B_0}(\vec{x}^{(0)} - \vec{x})$ - požadujeme, aby pro rostoucí k šlo k 0
- pro konvergenci je tedy nutné a stačí, aby $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B_k}\ldots\boldsymbol{B_0} = \boldsymbol{0}$

Metody:

- **nestacionární** – matice $\boldsymbol{B}$ v každém kroku jiná
- **stacionární** – matice $\boldsymbol{B}$ pořád stejná

Nestacionární metoda – Řízená relaxace

Řešíme soustavu $\boldsymbol{A}\vec{x} = \vec{b}$. Na počátku odhadneme řešení libovolně $\vec{x}^{(0)}$. Spočítáme reziduum $\boldsymbol{A}\vec{x}^{(0)} - \vec{b}$ a určíme jeho v absolutní hodnotě maximální složku. Potom volíme matici $\boldsymbol{B}$ tak, abychom tuto složku vynulovali. Například pro soustavu 3×3 , kde maximální je druhá složka, je to $a_{21}x_1^{(0)} + a_{22}x_2^{(0)} + a_{23}x_3^{(0)} - b_2$.

Požadujeme tedy, aby v následujícím kroku platilo $a_{21}x_1^{(1)} + a_{22}x_2^{(1)} + a_{23}x_3^{(1)} - b_2 = 0$. Z této rovnice vyjádříme i-tou, tedy v tomto případě druhou složku $x_2^{(1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^{(1)} - a_{23}x_3^{(1)})$.

Matici $\boldsymbol{B}$ a vektor $\vec{c}$ volíme tak, aby všechny složky až na i-tou zůstaly a pro i-tou složku aby platil předcházející vztah, tedy v našem případě

$x_2^{(1)} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21} x_1^{(0)} - a_{23} x_3^{(0)})$. To odpovídá volbě $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ a $\vec{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ 0 \end{pmatrix}$. V obecném případě tedy $\boldsymbol{B} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -\frac{a_{i1}}{a_{ii}} & -\frac{a_{i2}}{a_{ii}} & \dots & 0 & \dots & -\frac{a_{in}}{a_{ii}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots & 1 \end{pmatrix}$ a $\vec{c} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \frac{b_i}{a_{ii}} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$.

Tato metoda je výpočetně náročná, neboť je v každém kroku nutné hledat maximum rezidua. Proto se v praxi nepoužívá.

Stacionární metody
(Prostá iterace, Jakobiho, Gauss-Seidlova a Superrelaxační metoda)

- **Konvergence stacionárních metod**

Vlastní číslo λ matice $\boldsymbol{B}$ je číslo takové, že k němu existuje nenulový vlastní vektor, pro který platí $\boldsymbol{B}\vec{x} = \lambda \vec{x}$.

Nutná a postačující podmínka konvergence stacionárních iteračních metod je, že spektrální poloměr matice $\boldsymbol{B}$ musí být menší než 1 . Jinými slovy pro všechna vlastní čísla λ_i matice $\boldsymbol{B}$ musí platit $\rho(\boldsymbol{B}) = max_{i=1,\dots,n} |\lambda_i| < 1$.

Postačující podmínka konvergence metody pak je, že v některé maticové normě platí $\|\boldsymbol{B}\| < 1$.

(Z této podmínky samozřejmě plyne podmínka předcházející, neboť $|\lambda| \|\vec{x}\| = \|\lambda \vec{x}\| = \|\boldsymbol{B}\vec{x}\| \le \|\boldsymbol{B}\| \cdot \|\vec{x}\|$, tedy $|\lambda| \le \|\boldsymbol{B}\| < 1$.)

¿Proč požadujeme $max_{i=1,\dots,n} |\lambda_i| < 1$? Nějaká věta říká, že pro matici $\boldsymbol{B}$ platí následující ekvivalence $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B}^k = \boldsymbol{0} \Leftrightarrow \rho(\boldsymbol{B}) < 1$. Pro konvergenci jsme již dříve ukázaly podmínku $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B_k} \dots \boldsymbol{B_0} = \boldsymbol{0}$, tedy ve stacionárním případě $\lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B_k} \dots \boldsymbol{B_0} = \lim_{k\to\infty} \boldsymbol{B}^k = \boldsymbol{0}$.

Přesnost řešení můžeme odhadnout jako $\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\| = \|\vec{x}^{(k)} - \boldsymbol{A}^{-1}\vec{b}\| = \|\boldsymbol{A}^{-1}(\boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b})\| \le \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \cdot \|\boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b}\|$.

- **Prostá iterace**

Rovnici $\boldsymbol{A}\vec{x} = \vec{b}$ můžeme přepsat jako $\vec{x} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})\vec{x} + \vec{b}$.

Prostá iterace je založena právě na tomto vzorci, tedy $\vec{x}^{(k+1)}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})\vec{x}^{(k)}+\vec{b}$.

Jako matice $\boldsymbol{B}$ je tedy volena matice $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}$ a jako vektor $\vec{c}$ je volen vektor $\vec{b}$.

<u>Přesnost můžeme odhadnout následovně:</u>

$$\vec{x}^{(k)}=\boldsymbol{B}\vec{x}^{(k-1)}+\vec{b}=$$

$$=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}\vec{x}^{(k-2)}+\vec{b})+\vec{b}=$$

$$=\boldsymbol{B}^{2}x^{(k-2)}+\boldsymbol{B}\vec{b}+\vec{b}=\ldots=$$

$$=\boldsymbol{B}^{k}\vec{x}^{(0)}+\boldsymbol{B}^{k-1}\vec{b}+\boldsymbol{B}^{k-2}\vec{b}+\ldots+\vec{b}$$

Platí dále implikace : jestliže $\rho(\boldsymbol{B})<1$, pak $\lim\limits_{m\to\infty}\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{2}+\ldots+\boldsymbol{B}^{m}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})^{-1}$.

(v podstatě jde o geometrickou posloupnost matic)

Pro řešení $\vec{x}$ pak z předchozího platí $\vec{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\vec{b}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B})^{-1}\vec{b}=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{2}+\ldots)\vec{b}$.

$$\|\vec{x}^{(k)}-\vec{x}\|=\|\boldsymbol{B}^{k}\vec{x}^{(0)}+(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}+\ldots+\boldsymbol{B}^{k-1})\vec{b}-(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{2}+\ldots)\vec{b}\|=$$

$$=\|\boldsymbol{B}^{k}\vec{x}^{(0)}-(\boldsymbol{B}^{k}+\boldsymbol{B}^{k+1}+\ldots)\vec{b}\|=$$

$$=\|\boldsymbol{B}^{k}(\vec{x}^{(0)}-(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{2}+\ldots)\vec{b})\|\le$$

$$\le\|\boldsymbol{B}^{k}\|\cdot\|\vec{x}^{(0)}-(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{2}+\ldots)\vec{b}\|\le$$

$$\le\|\boldsymbol{B}\|^{k}\cdot\|\vec{x}^{(0)}-(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{2}+\ldots)\vec{b}\|\le$$

$$\le\|\boldsymbol{B}\|^{k}\cdot\left[\|\vec{x}^{(0)}\|+\left(\|\boldsymbol{I}\|+\|\boldsymbol{B}\|+\|\boldsymbol{B}^{2}\|+\ldots\right)\|\vec{b}\|\right]\le$$

$$\le\|\boldsymbol{B}\|^{k}\cdot\left[\|\vec{x}^{(0)}\|+\frac{\|\vec{b}\|}{1-\|\boldsymbol{B}\|}\right]$$

Metoda prosté iterace se pro systémy lineárních rovnic prakticky nepoužívá.

- **Jacobiho metoda**

V čem metoda spočívá?

Hledáme řešení rovnice $\boldsymbol{A}\vec{x}=\vec{b}$. Napíšeme i-tou rovnici z této soustavy $\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j - b_i = 0$. Z této rovnice vyjádříme x_i jako $x_i = \frac{1}{a_{ii}}\left(\sum_{j=1,\, j\neq i}^{n} a_{ij}x_j - b_i\right)$ a takto provádíme iterace

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

Jinak se to dá pro matici soustavy $\boldsymbol{A}$ (řádu 3) formulovat takto.

Matice $\boldsymbol{A}$ se rozloží na součet 3 matic podle následujícího vzoru.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \boldsymbol{D}+\boldsymbol{L}+\boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} d_{11} & 0 & 0 \\ 0 & d_{22} & 0 \\ 0 & 0 & d_{33} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ l_{21} & 0 & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & r_{12} & r_{13} \\ 0 & 0 & r_{23} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Z těchto tří matic se pak vytvoří matice $\boldsymbol{B}$

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{R}) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{d_{11}} & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{d_{22}} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{d_{33}} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 & r_{12} & r_{13} \\ l_{21} & 0 & r_{23} \\ l_{31} & l_{32} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{a_{12}}{a_{11}} & -\frac{a_{13}}{a_{11}} \\ -\frac{a_{21}}{a_{22}} & 0 & -\frac{a_{23}}{a_{22}} \\ -\frac{a_{31}}{a_{33}} & -\frac{a_{32}}{a_{33}} & 0 \end{pmatrix}$$

a vektor $\vec{c}$ se definuje jako

$$\vec{c} = \boldsymbol{D}^{-1}\vec{b} = \begin{pmatrix} \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{b_2}{a_{22}} \\ \frac{b_3}{a_{33}} \end{pmatrix} .$$

Iterace se provádí podle obecného vzorce $\vec{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{B}\vec{x}^{(k)} + \vec{c}$.

Už z formulace úlohy je patrné, že matice $\boldsymbol{A}$ nesmí mít nulové diagonální prvky.

Pro Jakobiho metodu je konvergence zaručená pro matice soustavy $\boldsymbol{A}$ diagonálně dominantní:

Diagonální dominance je definována $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}|$. Z toho plyne $\sum_{j=1, j\neq i}^{n} \left|\frac{a_{ij}}{a_{ii}}\right| < 1$ a tedy pro maximovou normu matice $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{R})$ platí $\|\boldsymbol{B}\| < 1$.

- **Metoda Gauss-Seidlova**

Téměř stejná, jako Jacobiho, jen vždy používáme už všechny nově spočítané složky vektoru $\vec{x}$.
Konvergence pro poměrně širokou třídu matic $\boldsymbol{A}$, ale může být velmi pomalá.

<u>Porovnání s předchozími metodami:</u>

Gauss-Seidl

$$x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}+\frac{1}{a_{ii}}\left(-a_{i1}x_1^{(k+1)}-\ldots-a_{ii-1}x_{i-1}^{(k+1)}-a_{ii}x_i^{(k)}-\ldots-a_{in}x_n^{(k)}+b_i\right)$$

$$\vec{x}^{(k+1)}=\vec{x}^{(k)}-(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}\left(\boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)}-\vec{b}\right)$$

$$\boldsymbol{B}=-(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{R} \qquad \vec{c}=(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}\vec{b}$$

konvergence zaručena $\boldsymbol{A}$ diagonálně dominantní nebo pozitivně definitní

přímá iterace

$$x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}-a_{i1}x_1^{(k)}-a_{i2}x_2^{(k)}-\ldots-a_{in}x_n^{(k)}+b_i$$

$$\vec{x}^{(k+1)}=\vec{x}^{(k)}-\left(\boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)}-\vec{b}\right)$$

$$\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}) \qquad \vec{c}=\vec{b}$$

Jacobiho metoda

$$x_i^{(k+1)}=x_i^{(k)}+\frac{1}{a_{ii}}\left(-a_{i1}x_1^{(k)}-a_{i2}x_2^{(k)}-\ldots-a_{in}x_n^{(k)}+b_i\right)$$

$$\vec{x}^{(k+1)}=\vec{x}^{(k)}-\boldsymbol{D}^{-1}\left(\boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)}-\vec{b}\right)$$

$$\boldsymbol{B}=-\boldsymbol{D}^{-1}(\boldsymbol{L}+\boldsymbol{R}) \qquad \vec{c}=\boldsymbol{D}^{-1}\vec{b}$$

konvergence zaručena $\boldsymbol{A}$ diagonálně dominantní

- **Superrelaxační metoda**

Vlastně urychlení konvergence Gauss-Seidlovy metody. V Gauss-Seidlově metodě označíme $\Delta\vec{x}^{(k)}=\vec{x}^{(k+1)}-\vec{x}^{(k)}$. V Gauss-Seidlově metodě tedy platí $\vec{x}^{(k+1)}=\vec{x}^{(k)}+\Delta\vec{x}^{(k)}$.

Superrelaxační metoda pak tento vztah přeformuluje takto $\vec{x}^{(k+1)}=\vec{x}^{(k)}+\omega\Delta\vec{x}^{(k)}$, kde ω je z intervalu $(0,2)$ ($\omega < 1$ subrelaxační, $\omega > 1$ superrelaxační, $\omega = 1$ Gauss-Seidl).

Relaxační faktor ω slouží tedy k urychlení konvergence a jeho optimální hodnotu lze vypočítat podle vztahu $\omega_{opt}=\dfrac{2}{1+\sqrt{1-\rho^2(\boldsymbol{B}_{GS})}}$, kde $\boldsymbol{B}_{GS}=-(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{L})^{-1}\boldsymbol{R}$ je matice $\boldsymbol{B}$ z Gauss-Seidlovy metody.

(Upozornění: V některých materiálech se matice $\boldsymbol{L}$ a $\boldsymbol{R}$ násobí -1 při odvozování Gauss-Seidlovy a Superrelaxační metody.)

Příklad na Superrelaxační metodu v PASCALU **DEMRELAX.PAS** . Matice MATREL1.DAT , MATREL.DAT .

Problém vlastních čísel

Vlastní číslo : λ , $\exists \vec{x} \neq \vec{0}$, že $\boldsymbol{A}\vec{x} = \lambda \vec{x}$, λ vlastní číslo, $\vec{x}$ je vlastní vektor $\boldsymbol{A}$.

Řeší se problémy: **úplný** nebo **částečný**

Vlastní čísle lze počítat z **charakteristického polynomu** matice $\boldsymbol{A}$ - $det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0$.

Pro matici $n \times n$ se jedná o polynom n-tého stupně, který má tedy n kořenů (mohou být i násobné, komplexně sdružené). Ke každému vlastnímu číslu existuje alespoň jeden vlastní vektor.

Matice je **defektní** – má méně než n LN vlastních vektorů

Normální matice (splňuje vztah $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{A}$) má n LN vlastních vektorů.

Symetrická matice ($\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}$) má všechna vlastní čísla reálná.

Trojúhelníková matice má vlastní čísla na diagonále.

Matice **podobné** (matice $\boldsymbol{A}$ a $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$) mají stejná vlastní čísla, neboť $det(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} - \lambda \boldsymbol{I}) = det(\boldsymbol{P}^{-1}(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{P}) = det(\boldsymbol{P}^{-1})\,det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\,det(\boldsymbol{P}) = det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})$.

Ke každé matici existuje matice jí podobná v Jordanově normálním tvaru. K normálním maticím existuje dokonce podobná diagonální matice.

Numerické metody řešení úplného problému– travsformace na přibližně diagonální nebo trojúhelníkový tvar.

- **Jacobiho transformace**

Najde všechny vlastní čísla symetrické matice. Cílem metody je podobnostními transformacemi postupné zmenšování mimodiagonálních prvků.

Postup:

Nalezení v absolutní hodnotě maximálního mimodiagonálního prvku a_{pq} .

Podobnostní transformace – pootočení os, aby se čtvercová matice $\begin{pmatrix} a_{pp} & a_{pq} \\ a_{qp} & a_{qq} \end{pmatrix}$ prvků

matice $\boldsymbol{A}$ stala diagonální. Matice transformace je $\boldsymbol{T}_{pq}=\begin{vmatrix} 1 & . & . & . & . & . & 0 \\ . & \ddots & . & . & . & . & . \\ . & . & c & \dots & -s & . & . \\ . & . & \vdots & 1 & \vdots & . & . \\ . & . & s & \dots & c & . & . \\ . & . & . & . & . & \ddots & . \\ 0 & . & . & . & . & . & 1 \end{vmatrix}$.

Pro koeficienty c , s platí $c=\cos(\varphi)$, $s=\sin(\varphi)$. Po k-té iteraci je prvek matice $\boldsymbol{A}$ $a_{pq}^{(k)}=(c^2-s^2)a_{pq}^{(k-1)}-cs(a_{pp}^{(k-1)}-a_{qq}^{(k-1)})$ a abychom ho nulovaly, musíme volit úhel φ jako tak, že $\tan(2\varphi)=\dfrac{2\ a_{pq}}{a_{pp}-a_{qq}}$.

Příklad v PASCALU **ZKJACOBI.PAS** , matice JAC1.DAT , JAC2.DAT .

- **LU rozklad**

Pomalá konvergence, nutný velký počet operací.

Provádí se rozklad $\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{U}_k$ a dále se volí $\boldsymbol{A}_{k+1}=\boldsymbol{U}_k\boldsymbol{L}_k$. Matice $\boldsymbol{U}_k$ se volé jako ortogonální, tedy $\boldsymbol{U}_k^T\boldsymbol{U}_k=\boldsymbol{I}$. Z toho plyne, že matice $\boldsymbol{A}_k$ a $\boldsymbol{A}_{k+1}$ jsou si podobné.

$$\boldsymbol{A}_{k+1}=\boldsymbol{U}_k\boldsymbol{L}_k=\boldsymbol{U}_k\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{U}_k\boldsymbol{U}_k^T=\boldsymbol{L}_k\boldsymbol{U}_k=\boldsymbol{A}_k$$

- **Částečný problém vlastních čísel**

Hledá se nejčastěji extrémní vlastní číslo (v absolutní hodnotě největší, nejmenší).

Například metoda:

$$\vec{x}^{(k+1)}=\frac{1}{\rho_k}\boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)} \text{ , kde } \rho_k=\vec{e}_1^{\,T}\boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)} \text{ (} \rho_k \text{ je první složka } \boldsymbol{A}\vec{x}^{(k)} \text{)}$$

platí $\lim_{k\to\infty}\rho_k=\lambda$ a $\lim_{k\to\infty}\vec{x}^{(k)}=\vec{x}_1$

Nejmenší vlastní čísla matice $\boldsymbol{A}$ jsou největší matice $\boldsymbol{A}^{-1}$.

Druhé nejmenší vlastní číslo – redukce matice na řád $n-1$.

Vlastní číslo v nějaké oblasti – posun $(\boldsymbol{A}+\mu\boldsymbol{I})\vec{x}=(\lambda+\mu)\vec{x}$.

Příklad v PASCALU CASTP.PAS , matice např. MATREL.DAT , MATREL1.DAT ...