Системы линейных алгебраических уравнений. Часть 3. Итерационные методы решения

Скалько Юрий Иванович
Цыбулин Иван

Задача

Рассмотрим систему уравнений $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, где

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 20 & 0 & -6 \\ 0 & 20 & 7 \\ -6 & 7 & 8 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 26 \\ -7 \\ -14 \end{pmatrix}$$

Выпишем для нее методы Якоби и Зейделя и исследуем их на сходимость

Метод Якоби

Метод Якоби получается, если в системе уравнений $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ диагональные неизвестные брать с итерации $k+1$, а внедиагональные — с k.

$$\begin{cases} 20x_1^{(k+1)} + 0x_2^{(k)} - 6x_3^{(k)} & = 26 \\ 0x_1^{(k)} + 20x_2^{(k+1)} + 7x_3^{(k)} & = -7 \\ -6x_1^{(k)} + 7x_2^{(k)} + 8x_3^{(k+1)} & = -14 \end{cases}$$

Перепишем в виде метода простой итерации $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}_k + \mathbf{f}$:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} & = \frac{3}{10}x_3^{(k)} + \frac{13}{10} \\ x_2^{(k+1)} & = -\frac{7}{20}x_3^{(k)} - \frac{7}{20} \\ x_3^{(k+1)} & = \frac{3}{4}x_1^{(k)} - \frac{7}{8}x_2^{(k)} - \frac{7}{4} \end{cases}$$

Сходимость метода Якоби

Диагонального преобладания (достаточное условие) у $\mathbf{A}$ нет, поэтому метод Якоби может не сходится. Будем проверять необходимое и достаточное условие метода простых итераций $|\lambda(\mathbf{B})| < 1$.

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{3}{10} \\ 0 & 0 & -\frac{7}{20} \\ \frac{3}{4} & -\frac{7}{8} & 0 \end{pmatrix}$$

$$\det(\mathbf{B} - \lambda\mathbf{E}) = -\lambda\left(\lambda^2 - \frac{49}{160}\right) + \frac{9}{40}\lambda = \lambda\left(\frac{85}{160} - \lambda^2\right) = 0$$

$$\lambda = \left\{0, \pm\sqrt{\frac{17}{32}}\right\}, \quad |\lambda(\mathbf{B})| < 1$$

Метод сходится при любом начальном приближении

Метод Зейделя

Метод Зейделя получается, если в системе уравнений $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ неизвестные на диагонали и ниже брать с итерации $k+1$, а остальные — с k.

$$\begin{cases} 20x_1^{(k+1)} + 0x_2^{(k)} - 6x_3^{(k)} & = 26 \\ 0x_1^{(k+1)} + 20x_2^{(k+1)} + 7x_3^{(k)} & = -7 \\ -6x_1^{(k+1)} + 7x_2^{(k+1)} + 8x_3^{(k+1)} & = -14 \end{cases}$$

Перепишем в виде метода простой итерации $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}_k + \mathbf{f}$:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} & = \frac{3}{10}x_3^{(k)} + \frac{13}{10} \\ x_2^{(k+1)} & = -\frac{7}{20}x_3^{(k)} - \frac{7}{20} \\ x_3^{(k+1)} & = \frac{3}{4}\left(\frac{3}{10}x_3^{(k)} + \frac{13}{10}\right) - \frac{7}{8}\left(-\frac{7}{20}x_3^{(k)} - \frac{7}{20}\right) - \frac{7}{4} = \frac{17}{32}x_3^{(k)} - \frac{15}{32} \end{cases}$$

Сходимость метода Зейделя

Хотя матрица $\mathbf{A} = \mathbf{A}^{\mathsf{T}} > 0$ и удовлетворяет достаточному условию сходимости метода Зейделя, проверим сходимость по определению.

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{3}{10} \\ 0 & 0 & \frac{-7}{20} \\ 0 & 0 & \frac{17}{32} \end{pmatrix}$$

Найдем $\lambda(\mathbf{B})$:

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{E}) = \lambda^2 \left(\frac{17}{32} - \lambda \right) = 0$$

$$\lambda = \left\{ 0, 0, \frac{17}{32} \right\}$$

Все $\lambda(\mathbf{B})$ лежат в единичном круге, а значит, метод сходится.

Немонотонная сходимость итерационных методов

Возможны случаи, когда итерационные методы сначала удаляются от точного решения, а затем начинают приближаться. Это называется немонотонной сходимостью итерационного процесса.

Будет сходимость метода монотонной или нет, зависит от матрицы итерационного процесса $\mathbf{B}$, используемого начального приближения и нормы, в которой изучается сходимость.

Введем невязку $\mathbf{r}_k = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}^*$, где $\mathbf{x}^*$ — точное решение.

Вычитая из $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}_k + \mathbf{f}$ предельное равенство $\mathbf{x}^* = \mathbf{B}\mathbf{x}^* + \mathbf{f}$, получаем соотношение для невязки

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{r}_k$$

Немонотонная сходимость итерационных методов

На каждом шаге процесса невязка умножается на матрицу $\mathbf{B}$.

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{r}_k$$

Нас интересует, будет ли норма невязки $\varepsilon_k = \|\mathbf{r}_k\|_\bullet$ стремится к нулю монотонно или нет. Рассмотрим случаи

- $q = \|B\|_\bullet < 1$. В этом случае сходимость монотонная:

$$\varepsilon_{k+1} = \|\mathbf{r}_{k+1}\|_\bullet = \|\mathbf{B}\mathbf{r}_k\|_\bullet \leq \|\mathbf{B}\|_\bullet \|\mathbf{r}_k\|_\bullet = q\varepsilon_k < \varepsilon_k$$

- $q = \|B\|_\bullet \geq 1$. Возьмем $\mathbf{r}_0 \neq 0$ такое, чтобы

$$\|\mathbf{B}\mathbf{r}_0\|_\bullet = \|\mathbf{B}\|_\bullet \|\mathbf{r}_0\|_\bullet$$

  Получаем, что $\varepsilon_1 = \|\mathbf{r}_1\|_\bullet = \|\mathbf{B}\mathbf{r}_0\|_\bullet = q\|\mathbf{r}_0\|_\bullet = q\varepsilon_0 \geq \varepsilon_0$
  Для начального приближения $\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}^* + \mathbf{r}_0$ сходимость будет немонотонная.

Немонотонная сходимость

Например, для рассмотренного метода Якоби

$$\mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{3}{10} \\ 0 & 0 & -\frac{7}{20} \\ \frac{3}{4} & -\frac{7}{8} & 0 \end{pmatrix}$$

сходимость в норме $\| \; \|_1$ будет монотонная ($\|\mathbf{B}\|_1 = \frac{7}{8} < 1$), а в норме $\| \; \|_\infty$ — не всегда. Норма $\|\mathbf{B}\|_\infty = \frac{13}{8}$ достигается на векторе $\mathbf{r}_0 = (1, -1, 0)^\mathsf{T}$. В качестве начального приближения можно взять

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{x}^* + r_0 = (1, 0, -1)^\mathsf{T} + (1, -1, 0)^\mathsf{T} = (2, -1, -1)^\mathsf{T}$$

Число итераций

Предположим, что некоторая норма $\|\mathbf{B}\|_\bullet = q < 1$ оказалась меньше единицы. Как оценить число итераций N, необходимых, чтобы обеспечить $\varepsilon_N = \|\mathbf{x}_N - \mathbf{x}^*\|_\bullet < \varepsilon$, где ε задано?
Воспользуемся соотношением

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{r}_k \Rightarrow \varepsilon_{k+1} \leq q\varepsilon_k \leq \dots \leq q^{k+1}\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^*\|_\bullet$$

В этой оценке имеется решение $\mathbf{x}^*$, которое заранее не известно. Избавимся от него следующим способом

$$\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_*\|_\bullet \leq \|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_1\|_\bullet + \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_*\|_\bullet \leq \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\bullet + q\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_*\|_\bullet$$
$$(1-q)\|\mathbf{x}_0 - \mathbf{x}_*\| \leq \|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|$$

Получаем оценку

$$\varepsilon_N \leq \frac{q^N}{1-q}\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\bullet, \qquad N = \left\lceil \frac{\ln((1-q)\varepsilon) - \ln\|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_0\|_\bullet}{\ln q} \right\rceil$$

Пусть матрица $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\mathsf{T} > 0$. Запишем метод простой итерации с параметром τ

$$\mathbf{x}_{k+1} = (\mathbf{E} - \tau\mathbf{A})\mathbf{x}_k + \tau\mathbf{b}$$

Здесь $\mathbf{B} = \mathbf{E} - \tau\mathbf{A}$. У матрицы $\mathbf{B}$ такие же собственные вектора, что и у матрицы $\mathbf{A}$, а их собственные числа связаны отношением *

$$\lambda(\mathbf{B}) = 1 - \tau\lambda(\mathbf{A})$$

Необходимое и достаточное условие сходимости $|\lambda(\mathbf{B})| < 1$ ограничивает

$$0 < \tau < \frac{2}{\max\lambda(\mathbf{A})} \equiv \frac{2}{\lambda_{max}}$$

*Если $\mathbf{A}\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}$, то $\mathbf{B}\mathbf{x} = (\mathbf{E} - \tau\mathbf{A})\mathbf{x} = \mathbf{x} - \tau\lambda\mathbf{x} = (1 - \tau\lambda)\mathbf{x}$

Скорость сходимости

Поскольку матрица $\mathbf{A}$ симметрична (следовательно и матрица $\mathbf{B}$), ее собственные вектора $\mathbf{w}_i$ образуют ортогональную систему. Обозначим $q_i = 1 - \tau\lambda_i$.

$$\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \lambda_i \mathbf{w}_i, \quad \mathbf{B}\mathbf{w}_i = q_i \mathbf{w}_i = (1 - \tau\lambda_i)\mathbf{w}_i$$

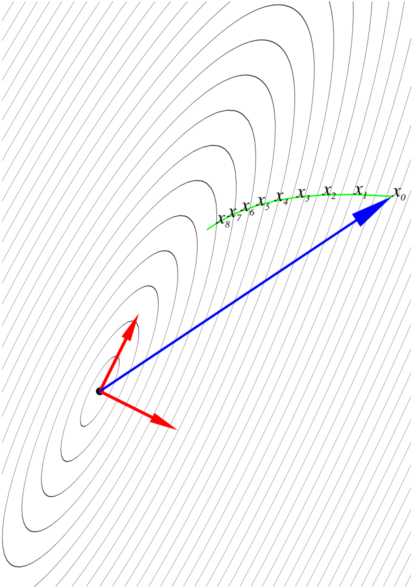
Разложим вектор невязки по этому базису из собственных векторов матриц $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$:

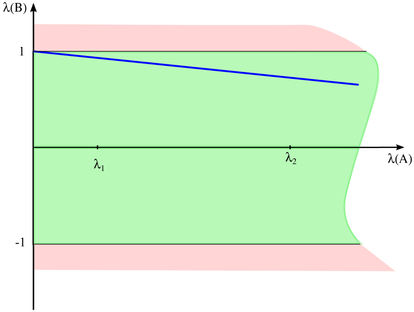
$$\mathbf{r}_k = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^{(k)} \mathbf{w}_i$$

$$\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{B}\mathbf{r}_k = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{B}\alpha_i^{(k)} \mathbf{w}_i = \sum_{i=1}^{n} (1 - \tau\lambda_i)\alpha_i^{(k)} \mathbf{w}_i$$

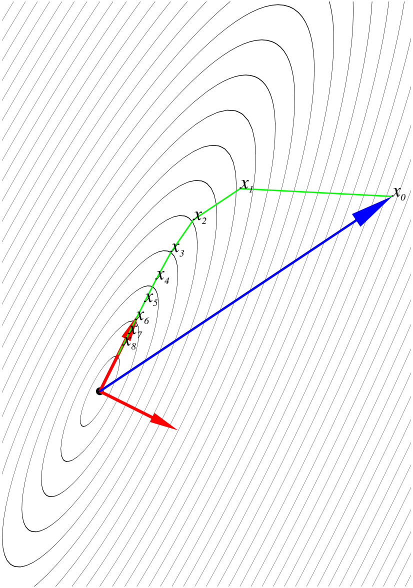
Получается, что $\alpha_i^{(k)} = q_i^k \alpha_i^{(0)}$, то есть i-я компонента невязки стремится к нулю со скоростью $|q_i|$.

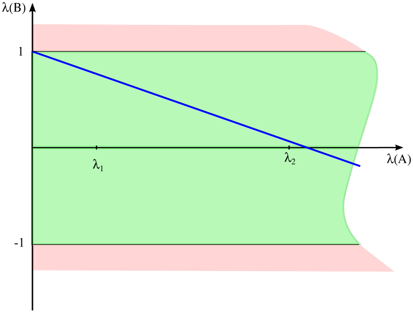
Метод простой итерации при $\tau \ll \frac{1}{\lambda_{max}}$



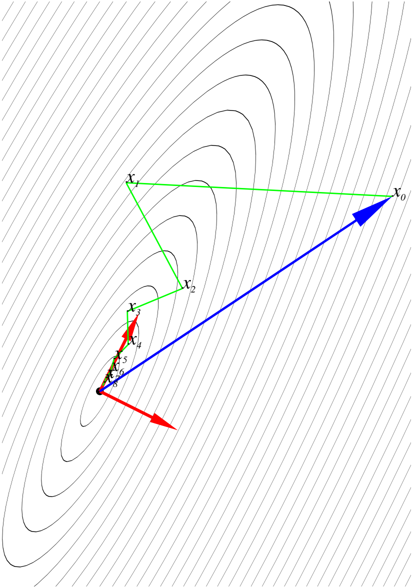


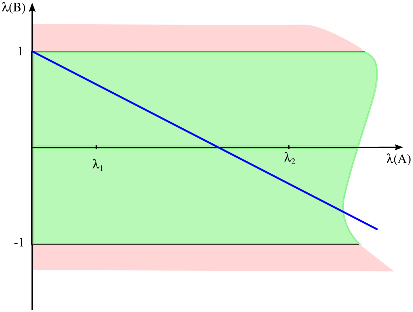
Метод простой итерации при $\tau \approx \frac{1}{\lambda_{max}}$



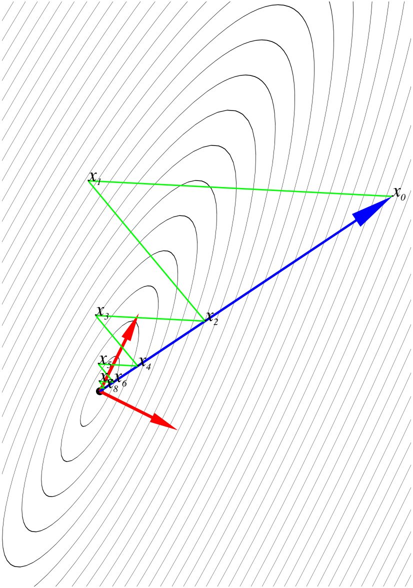


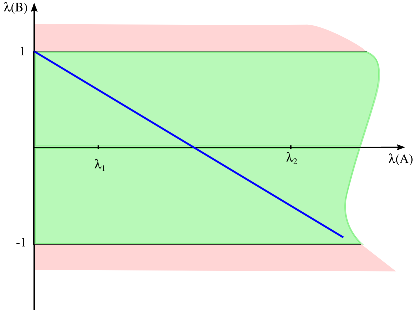
Метод простой итерации при $\tau < \tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_{\min}+\lambda_{\max}}$



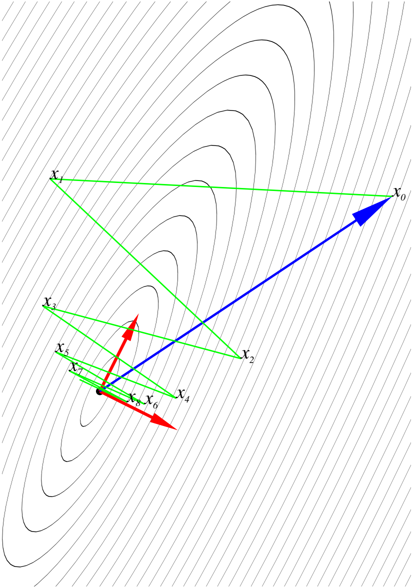


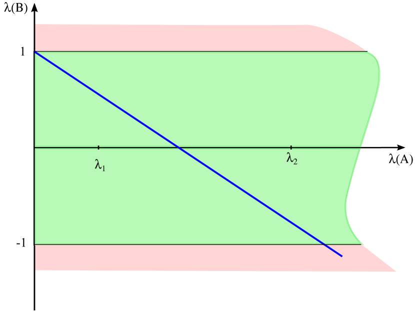
Метод простой итерации при $\tau = \tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_{\min}+\lambda_{\max}}$



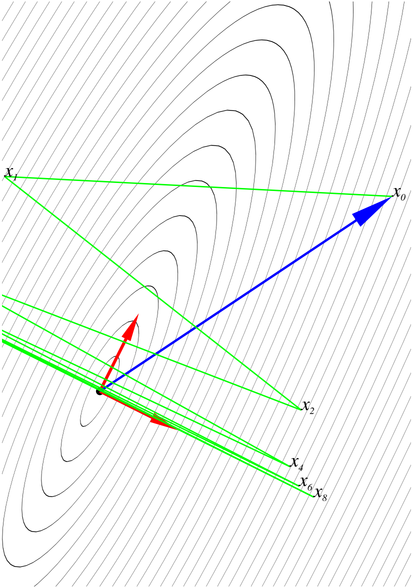


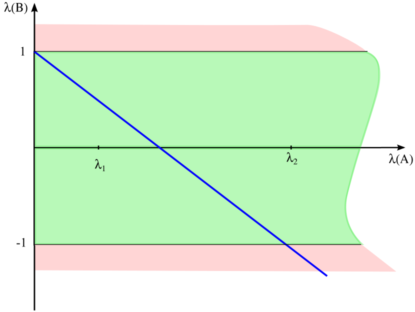
Метод простой итерации при $\tau > \tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_{\min}+\lambda_{\max}}$





Метод простой итерации при $\tau > \frac{2}{\lambda_{max}}$





Поведение при различных значениях параметра

Можно сделать несколько выводов

- При малом τ ($\tau \ll \frac{1}{\lambda_{max}}$) метод сходится очень медленно, и основным "тормозом" является часть невязки, которая соответствует первому собственному вектору ($\lambda = \lambda_{min}$). Скорость сходимости $q = 1 - \tau\lambda_{min}$
- При достаточно большом τ ($\tau > \frac{2}{\lambda_{\max}}$) метод расходится
- При отрицательном τ ($\tau < 0$) метод расходится
- При большом τ ($\tau \lesssim \frac{2}{\lambda_{\max}}$) метод сходится медленно, здесь "тормозом" является уже максимальное собственное число. Скорость сходимости $q = \tau\lambda_{\max} - 1$
- При некотором τ ($\tau = \tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_{\min}+\lambda_{\max}}$) компоненты невязки с $\lambda = \lambda_{\min}$ и $\lambda = \lambda_{\max}$ стремятся к нулю с одинаковой скоростью. Промежуточные компоненты стремятся к нулю еще быстрее. Этот вариант оптимален по скорости сходимости $q = q_{opt} = \frac{\lambda_{\max}-\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}+\lambda_{\min}}$

Возможно ли, что в некоторых условиях при $\tau \neq \tau_{opt}$ невязка будет стремиться к нулю быстрее, чем при $\tau = \tau_{opt}$?

Оказывается, что да, но только при определенных начальных приближениях. Просиходит это, когда некоторые коэффициенты $\alpha_i^{(0)}$ в разложении невязки по собственным векторам матрицы обращаются в ноль. При этом не важно, чему равно соответствующее q_i, $\alpha_i^{(k)} = q_i^k \alpha_i^{(0)}$ будет продолжать оставаться нулем.
Однако, важно не нарушать условие $|q_i| \leq 1$. В противном случае $\alpha_i^{(k)}$ может легко вырасти из "машинного нуля" до больших чисел и остановить сходимость процесса.

Вернемся к системе $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ с

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 20 & 0 & -6 \\ 0 & 20 & 7 \\ -6 & 7 & 8 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 26 \\ -7 \\ -14 \end{pmatrix}$$

Собственные числа λ_i и вектора $\mathbf{w}_i$ для этой системы:

$$\lambda_{min} = \lambda_1 = 3 < \lambda_2 = 20 < \lambda_3 = 25 = \lambda_{max}$$

$$\mathbf{w}_1 = \begin{pmatrix} 6 \\ -7 \\ 17 \end{pmatrix} \quad \mathbf{w}_2 = \begin{pmatrix} 7 \\ 6 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{w}_3 = \begin{pmatrix} 6 \\ -7 \\ -5 \end{pmatrix}$$

Рассмотрим начальное приближение $\mathbf{x}_0 = (0, -13, 16)^\mathsf{T}$.
Соответствующая невязка

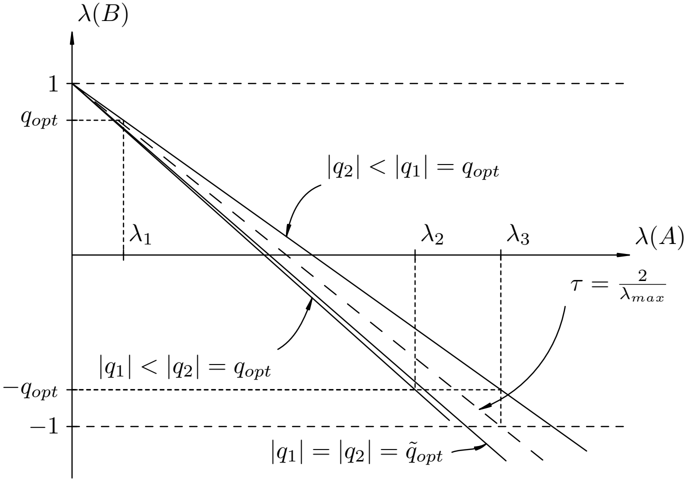
$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^* = \begin{pmatrix} 0 \\ -13 \\ 16 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ -13 \\ 17 \end{pmatrix} = \mathbf{w}_1 - \mathbf{w}_2$$

В начальной невязке отсутствует компонента, соответствующая максимальному собственному числу (λ_3)
Скорость сходимости q определяется самой медленно сходящейся компонентой из оставшихся

$$q = \max(|q_1|, |q_2|, \cancel{|q_3|}) = \max(|1 - \tau\lambda_1|, |1 - \tau\lambda_2|)$$

Сходимость при $\alpha_3 = 0$

Найдем, при каких τ величина $q = \max(|1 - \tau\lambda_1|, |1 - \tau\lambda_2|)$ оказывается меньше q_{opt} (то есть сходимость быстрее).



Сходимость при $\alpha_3 = 0$

Величина $q = \max(|q_1, q_2|)$ оказывается меньше q_{opt} в диапазоне

$$\tau \in \left(\tau_{opt}, \frac{1 + q_{opt}}{\lambda_2}\right)$$

Сходимость при этих τ и данном начальном приближении будет действительно быстрее, чем при τ_{opt}.
Однако, при $\tau > \frac{2}{\lambda_3}$ итерационный процесс потеряет устойчивость (q_3 станет больше 1), третья компонента в невязке (которая имелась из-за численных ошибок), быстро вырастет при $q_3 > 1$. Поэтому для вычислительно устойчивого процесса

$$\tau \in \left(\tau_{opt}, \frac{1 + q_{opt}}{\lambda_2}\right) \cap \left[0, \frac{2}{\lambda_3}\right]$$

Сходимость при $\alpha_3 = 0$

Найдем численное выражение для границ τ для конкретной матрицы из задачи:

$$\tau_{opt} = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_3} = \frac{2}{3 + 25} = \frac{1}{14} \approx 0.0714$$

$$q_{opt} = \frac{\lambda_3 - \lambda_1}{\lambda_1 + \lambda_3} = \frac{25 - 3}{25 + 3} = \frac{11}{14} \approx 0.7857$$

$$\tau \in \left(\tau_{opt}, \frac{1 + q_{opt}}{\lambda_2}\right) \cap \left[0, \frac{2}{\lambda_3}\right] = \left(\frac{1}{14}, \frac{5}{56}\right) \cap \left[0, \frac{2}{25}\right] = \left(\frac{1}{14}, \frac{2}{25}\right]$$

Быстрее всего метод при таком начальном приближении сходится при $q_1 = -q_2$ и $\tilde{\tau}_{opt} = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_2} = \frac{2}{23}$. Поскольку это значение больше $\frac{2}{\lambda_3}$, *вычислительно устойчивый* метод быстрее всего сходится при $\tau = \frac{2}{\lambda_3}$. Это ближайшее значение из множества устойчивых параметров $\left[0, \frac{2}{\lambda_3}\right]$ к $\tilde{\tau}_{opt}$.

Сходимость при специальных приближениях

Рассмотрим теперь другое начальное приближение $\mathbf{x}_0 = (14, -1, -6)^\mathsf{T}$. Начальная невязка

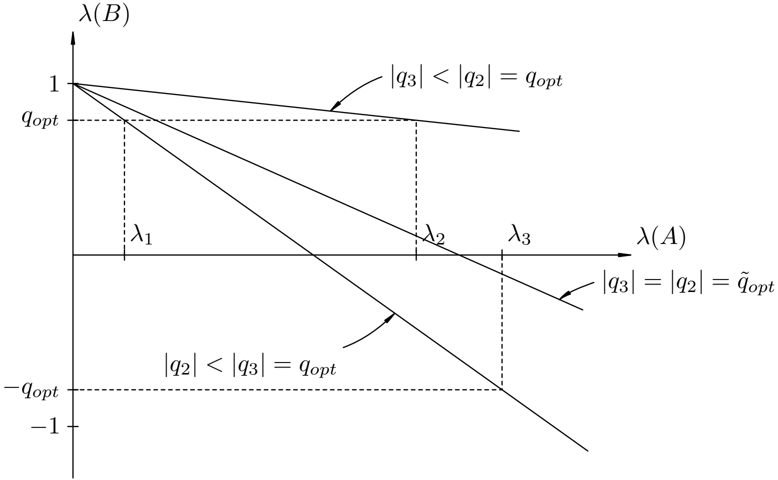
$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{x}_0 - \mathbf{x}^* = \begin{pmatrix} 14 \\ -1 \\ -6 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 13 \\ -1 \\ -5 \end{pmatrix} = \mathbf{w}_2 + \mathbf{w}_3$$

Теперь в невязке отсутствует первая компонента (λ_3). По аналогии с предыдущим пунктом,

$$q = \max(\cancel{|q_1|}, |q_2|, |q_3|) = \max(|1 - \tau\lambda_2|, |1 - \tau\lambda_3|)$$

Сходимость при $\alpha_1 = 0$

Найдем, при каких τ величина $q = \max(|1 - \tau\lambda_2|, |1 - \tau\lambda_3|)$ оказывается меньше q_{opt} (то есть сходимость быстрее).



Сходимость при $\alpha_1 = 0$

В диапазоне

$$\tau \in \left(\frac{1 - q_{opt}}{\lambda_2}, \tau_{opt} \right)$$

величина q оказывается меньше q_{opt}, то есть сходимость быстрее. Отметим, что данный диапазон оказыается лежащим целиком в отрезке устойчивых методов $\left[0, \frac{2}{\lambda_3}\right]$.

При данном начальном приближении максимальная скорость сходимости достигается при $q_2 = -q_3$ и $\tilde{\tau}_{opt} = \frac{2}{\lambda_2 + \lambda_3}$. Это значение $\tilde{\tau}_{opt}$ всегда приводит к устойчивому методу.

Для данной задачи

$$\tau \in \left(\frac{3}{280}, \frac{1}{14} \right), \quad \tilde{\tau}_{opt} = \frac{2}{45}$$

Спасибо за внимание!

tsybulin@crec.mipt.ru