Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Video na Youtube

1. Iterativní metody
2. Stacionární metody
3. Metoda postupných aproximací
4. Předpodmínění

Iterativní metody

Budeme se zabývat metodami pro řešení úlohy $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ s regulární maticí $\mathbb{A}$. **Chceme najít efektivnější metody, než je GEM.**

- iterativní metody generují posloupnost $\left\{\vec{x}^{(k)}\right\}_{k=1}^{\infty}$, která konverguje k řešení soustavy

$$\lim_{k\to\infty} \vec{x}^{(k)} = \vec{x}^*$$

- prakticky tak (obecně) nikdy nedostaneme přesné řešení, ale můžeme dostat (téměř) libovolně přesnou aproximaci

Iterativní metody obecně

- obecně platí, že volíme libovolné $\vec{x}^{(0)}$ a dále napočítáváme

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}^{(k)}\vec{x}^{(k)} + \vec{c}^{(k)},$$

  kde volba $\mathbb{B}^{(k)}$ a $\vec{c}^{(k)}$ záleží na použité metodě
- dále požadujeme, aby pro všechna k platilo

$$\vec{x}^{*} = \mathbb{B}^{(k)}\vec{x}^{*} + \vec{c}^{(k)},$$

  kde $\vec{x}^{*}$ je přesné řešení soustavy $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$

Iterativní metody obecně

Theorem 1

Iterativní metoda tvaru

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}^{(k)}\vec{x}^{(k)} + \vec{c}^{(k)},$$

splňující

$$\vec{x}^{*} = \mathbb{B}^{(k)}\vec{x}^{*} + \vec{c}^{(k)},$$

konverguje k $\vec{x}^{*}$ *pro libovolné* $\vec{x}^{(0)}$*, právě když*

$$\lim_{k\rightarrow\infty} \mathbb{B}^{(k)}\mathbb{B}^{(k-1)}\ldots\mathbb{B}^{(0)} = \theta.$$

Důkaz.

Video na Youtube

$\square$

Citlivost a stabilita iterativních metod

- pokud během výpočtu dojde k nějaké chybě, třeba vinou zaokrouhlení, můžeme se na výsledný vektor dívat jako na nové $\vec{x}^{(0)}$, **které může být libovolné** a metoda bude konvergovat i tak
- chyby ve výpočtech se tedy nekumulují, ale eliminují
- jde o tzv. **samoopravující** vlastnost iterativních metod
- tím pádem již dále nemusíme studovat citlivost iterativních metod na výpočetní chyby

Iterativní metody obecně

Iterativní metody pro řešení lineárních soustav se dělí na:

- **stacionární** – $\mathbb{B}^{(k)}$ a $\vec{c}^{(k)}$ jsou konstantní tj.

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}\vec{x}^{(k)} + \vec{c}$$

- **nestacionární** – $\mathbb{B}^{(k)}$ a $\vec{c}^{(k)}$ jsou různé pro každé k

Výhoda stacionárních metod je, že pracujeme jen s jednou maticí. Jsou proto jednodušší na implementaci a také na numerickou analýzu. Dále budeme studovat pouze stacionární metody.

Stacionární iterativní metody

Theorem 2

Metoda daná vztahem

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}\vec{x}^{(k)} + \vec{c}$$

a splňující

$$\vec{x}^{*} = \mathbb{B}\vec{x}^{*} + \vec{c},$$

konverguje k $\vec{x}^{*}$ *pro libovolné* $\vec{x}^{(0)}$*, právě když platí*

$$\lim_{k\to\infty} \mathbb{B}^{k} = \theta.$$

Důkaz.

Plyne z věty 1 a

$$\lim_{k\to\infty} \mathbb{B}^{(k-1)} \dots \mathbb{B}^{(0)} = \lim_{k\to\infty} \mathbb{B}^{k}.$$

Stacionární iterativní metody

Theorem 3

Metoda daná vztahem

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}\vec{x}^{(k)} + \vec{c},$$

a splňující

$$\vec{x}^{*} = \mathbb{B}\vec{x}^{*} + \vec{c},$$

konverguje k $\vec{x}^{*}$ *pro libovolné* $\vec{x}^{(0)}$*, právě když platí, že* $\rho\left(\mathbb{B}\right) < 1$*.*

Důkaz.

Plyne z podmínek pro konvergenci posloupnosti $\mathbb{B}^{k}$. □

Stacionární iterativní metody

Theorem 4

Postačující podmínkou pro to, aby metoda daná vztahem

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}\vec{x}^{(k)} + \vec{c},$$

a splňující

$$\vec{x}^* = \mathbb{B}\vec{x}^* + \vec{c},$$

konvergovala k $\vec{x}^*$ *pro libovolné* $\vec{x}^{(0)}$ *je, že* $\|\mathbb{B}\| < 1$ *v nějaké maticové normě* $\|\cdot\|$.

Důkaz.

Plyne z podmínek pro konvergenci posloupnosti $\mathbb{B}^k$. □

Stacionární iterativní metody

Theorem 5

Aposteriorní odhady chyb pro stacionární iterativní metody: *Pro metodu danou vztahem*

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}\vec{x}^{(k)} + \vec{c},$$

a splňující

$$\vec{x}^{*} = \mathbb{B}\vec{x}^{*} + \vec{c},$$

kde $\vec{x}^{*}$ *je řešením soustavy lineárních rovnic* $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$*, platí následující odhady chyby aproximace řešení:*

- $\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^{*}\right\| \leq \left\|\mathbb{A}^{-1}\right\| \left\|\mathbb{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b}\right\| = \left\|\mathbb{A}^{-1}\right\| \left\|\vec{r}^{(k)}\right\|,$
- $\left\|\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}^{*}\right\| \leq \left\|(\mathbb{I} - \mathbb{B})^{-1}\right\| \left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^{(k-1)}\right\|,$

při použití souhlasné maticové normy s danou vektorovou normou.

Remark 6

Zde jsme použili definici rezidua v k-té iteraci

$$\vec{r}^{(k)} = \mathbb{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b}.$$

Důkaz.

Video na Youtube

Stacionární iterativní metody

Remark 7

- *aposteriorní odhady chyb jsou důležité pro zjištění, kdy výpočet metody zastavit a to sice tehdy, je-li* $\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|$ *nebo* $\left\|\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}^{(k)}\right\|$ *dostatečně malé*
- *pojem "dostatečně malé" se často vztahuje k normě matice* $\mathbb{A}$ *nebo pravé strany* $\vec{b}$ *rovnice, tj. požadujeme např.*

$$\frac{\left\|\vec{r}^{(k)}\right\|}{\left\|\vec{b}\right\|} < \epsilon$$

Stacionární iterativní metody

Theorem 8

Apriorní odhad chyby pro stacionární iterativní metody:
Buď $\|B\| < 1$ *v nějaké maticové normě. Pak pro posloupnost* $\left\{\vec{x}^{(k)}\right\}_{k=1}^{\infty}$ *generovanou předpisem*

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbb{B}\vec{x}^{(k)} + \vec{c},$$

a splňující

$$\vec{x}^{*} = \mathbb{B}\vec{x}^{*} + \vec{c},$$

platí

$$\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^{*}\right\| \leq \|\mathbb{B}\|^{k} \left[\left\|\vec{x}^{(0)}\right\| + \frac{\|\vec{c}\|}{1 - \|\mathbb{B}\|}\right],$$

kde použitá maticová norma je souhlasná s použitou vektorovou normou.

Důkaz.

Video na Youtube

Stacionární iterativní metody

- nyní již víme, za jakých podmínek stacionární metoda konverguje k nějakému vektoru $\vec{x}^*$ a známé odhady chyb
- dále se budeme zabývat otázkou, jak volit matici $\mathbb{B}$ a vektor $\vec{c}$, aby vztah

$$\vec{x}^* = \mathbb{B}\vec{x}^* + \vec{c},$$

platil pro řešení $\vec{x}^*$ soustavy lineárních rovnic $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$

Metoda postupných aproximací

- při návrhu nejjednodušší iterativní metody chceme najít nějaký způsob, jak zlepšit určitou aproximaci řešení $\vec{x}^{(k)}$
- potřebujeme tedy odhadnout, jaké chyby se s danou aproximací dopouštíme
- **jediný odhad**, který máme k dispozici, je reziduum

$$\vec{r}^{(k)} = \mathbb{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b}$$

Metoda postupných aproximací

- zkusme tedy metodu

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - \vec{r}^{(k)} = \vec{x}^{(k)} - \mathbb{A}\vec{x}^{(k)} + \vec{b} = (\mathbb{I} - \mathbb{A})\,\vec{x}^{(k)} + \vec{b}$$

- vidíme, že metoda splňuje podmínku

$$\vec{x}^{*} = (\mathbb{I} - \mathbb{A})\,\vec{x}^{*} + \vec{b}\left(\Leftrightarrow \mathbb{A}\vec{x}^{*} = \vec{b}\right)$$

- je tedy

$$\begin{aligned} \mathbb{B} &= \mathbb{I} - \mathbb{A}, \\ \vec{c} &= \vec{b} \end{aligned}$$

- tuto metodu nazveme **metodou postupných aproximací**

Metoda postupných aproximací

```cpp
bool postupneAproximace( const Matrix& A,
                         const Vector& b,
                         Vector& x,
                         double eps )
{
   double normB = norm( b );
   double r = eps + 1.0;
   Vector y;
   while( r > eps )
   {
      /****
       * Postupne aproximace
       */
      r = 0.0;
      for( int i = 0; i < n; i++ )
      {
         double r_i = b[ i ];
         for( int j = 0; j < n; j++ )
               r_i = r_i - A[ i ][ j ] * x[ j ];
         y[ i ] = x[ i ] - r_i;
         r = r + r_i * r_i;
      }

      /****
       * Kopirovani y do x
       */
      for( int i = 0; i < n; i++ )
         x[ i ] = y[ i ];

      /****
       * Vypocet rezidua
       */
      r = sqrt( r ) / normB;
   }
}
```

Metoda postupných aproximací

- stacionární metody pro řešení soustav lineárních rovnic jsou implementovány v programu `stationary-solver`
  - `--input-file` – vstupní soubor s maticí
  - `--method` – použitá metoda
    - `richardson`, `jacobi`, `gauss-seidel` a `sor`
  - `--relaxation r` – relaxační parametr
  - `--matrix-format dense/ellpack` – formát pro uložení matice soustavy
    - pro řídké matice je určen formát `ellpack`
  - `--initial-value v` – nastavení vektoru $\vec{x}^{(0)}$
  - `--max-iterations n` – maximální možný počet provedených iterací
  - `--convergence-residue r` – hodnota kritéria pro zastavení výpočtu (jde o proměnnou `eps` v kódu)
  - `--verbose n`
    - nastavuje úroveň vypisovaných informací v průběhu výpočtu

Metoda postupných aproximací

- jak uvidíme později, metoda postupných aproximací je vlastně Richardsonova metoda s relaxačním parametrem rovným 1
- na tuto hodnotu je tento parametr nastaven automaticky, pokud neuvedeme jinak

Example 9

```
stationary-solver --method richardson \
                  --input-file data/matrix-pd.mtx
```

Metoda postupných aproximací

Theorem 10

Metoda postupných aproximací pro rovnici $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ (s regulární maticí $\mathbb{A}$) ve tvaru

$$\vec{x}^{(k+1)} = (\mathbb{I} - \mathbb{A})\,\vec{x}^{(k)} + \vec{b},$$

konverguje pro každé $\vec{x}^{(0)}$ k řešení zadané rovnice, právě když

$$\rho\,(\mathbb{I} - \mathbb{A}) < 1.$$

Je-li

$$\|\mathbb{I} - \mathbb{A}\| < 1,$$

pro nějakou maticovou normu $\|\cdot\|$, pak tato metoda také konverguje k řešení soustavy pro libovolné $\vec{x}^{(0)}$.

Důkaz.

Plyne snadno z podmínek pro konvergenci stacionárních metod. $\square$

Metoda postupných aproximací

Theorem 11

Buď $p(x)$ polynom proměnné x. Buď $\mathbb{A} \in C^{n,n}$, $\lambda \in \sigma(\mathbb{A})$. Pak $p(\lambda) \in \sigma(p(\mathbb{A}))$.

Důkaz.

Video na Youtube

$\square$

Metoda postupných aproximací

Theorem 12

Buď $\mathbb{A}$ hermitovská. Pak metoda postupných aproximací konverguje, právě když platí

$$2\mathbb{I} > \mathbb{A} > 0.$$

Důkaz.

Video na Youtube $\square$

Remark 13

Takových matic ale moc není.

Předpodmíněná metoda postupných aproximací

- abychom zlepšili konvergenci metody postupných aproximací, použijeme tzv. **předpodmínění**
- soustavu $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ vynásobíme vhodnou regulární maticí $\mathbb{H}$
- dostaneme soustavu

$$\mathbb{H}\mathbb{A}\vec{x} = \mathbb{H}\vec{b}$$

- řešení se tím nezmění

Předpodmíněná metoda postupných aproximací

- metoda postupných aproximací má nyní mít tvar

$$
\begin{aligned}
\vec{x}^{(k+1)} &= \vec{x}^{(k)} - \vec{r}^{(k)} \\
&= \vec{x}^{(k)} - \mathbb{H}\mathbb{A}\vec{x}^{(k)} + \mathbb{H}\vec{b} \\
&= \vec{x}^{(k)} - \mathbb{H}\left(\mathbb{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b}\right) \\
&= \left(\mathbb{I} - \mathbb{H}\mathbb{A}\right)\vec{x}^{(k)} + \mathbb{H}\vec{b}
\end{aligned}
$$

- a samozřejmě platí podmínka

$$
\left(\mathbb{I} - \mathbb{H}\mathbb{A}\right)\vec{x}^{*} + \mathbb{H}\vec{b} = \vec{x}^{*} - \mathbb{H}\mathbb{A}\vec{x}^{*} + \mathbb{H}\vec{b} = \vec{x}^{*}
$$

Předpodmíněná metoda postupných aproximací

- ze vztahu $\vec{x}^{(k+1)} = (\mathbb{I} - \mathbb{H}\mathbb{A})\,\vec{x}^{(k)} + \mathbb{H}\vec{b}$ vidíme, že

$$
\begin{aligned}
\mathbb{B} &= \mathbb{I} - \mathbb{H}\mathbb{A}, \\
\vec{c} &= \mathbb{H}\vec{b}
\end{aligned}
$$

- platí tedy následující věty

Předpodmíněná metoda postupných aproximací

Theorem 14

Předpodmíněná metoda postupných aproximací pro rovnici $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ (s regulární maticí $\mathbb{A}$) s předpodmíněním $\mathbb{H}$ ve tvaru

$$\vec{x}^{(k+1)} = (\mathbb{I} - \mathbb{H}\mathbb{A})\,\vec{x}^{(k)} + \mathbb{H}\vec{b},$$

konverguje pro každé $\vec{x}^{(0)}$ k řešení zadané rovnice, právě když

$$\rho\,(\mathbb{I} - \mathbb{H}\mathbb{A}) < 1.$$

Je-li

$$\|\mathbb{I} - \mathbb{H}\mathbb{A}\| < 1,$$

pro nějakou maticovou normu $\|\cdot\|$, pak tato metoda také konverguje k řešení soustavy pro libovolné $\vec{x}^{(0)}$.

Důkaz.

Plyne snadno z podmínek pro konvergenci stacionárních metod.

Předpodmíněná metoda postupných aproximací

Theorem 15

Buď $\mathbb{A}$ hermitovská a PD. Pak předpodmíněná metoda postupných aproximací konverguje, pokud platí

$$\mathbb{W} + \mathbb{W}^* > \mathbb{A} > 0,$$

kde $\mathbb{W} = \mathbb{H}^{-1}$. Konvergence je navíc monotónní vzhledem k vektorové normě $\|\cdot\|_A$.

Důkaz.

Video na Youtube $\square$

Remark 16

Pro metodu postupných aproximací bez předpodmínění, je $\mathbb{W} = \mathbb{I}$ a dostáváme již dokázané kritérium

$$2\mathbb{I} > \mathbb{A} > 0.$$

Předpodmíněná metoda postupných aproximací

- nyní vyvstává otázka, jak volit matici $\mathbb{H}$
- ze vztahu $\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} - \mathbb{H}\mathbb{A}\vec{x}^{(k)} + \mathbb{H}\vec{b}$ dostáváme, že při volbě $\mathbb{H} = \mathbb{A}^{-1}$ je

$$
\begin{aligned}
\vec{x}^{(k+1)} &= \vec{x}^{(k)} - \mathbb{H}\mathbb{A}\vec{x}^{(k)} + \mathbb{H}\vec{b} \\
&= \vec{x}^{(k)} - \mathbb{A}^{-1}\mathbb{A}\vec{x}^{(k)} + \mathbb{A}^{-1}\vec{b} \\
&= \vec{x}^{(k)} - \vec{x}^{(k)} + \vec{x}^{*} \\
&= \vec{x}^{*}
\end{aligned}
$$

- metoda by tak konvergovala po jedné iteraci
- získat $\mathbb{A}^{-1}$ ale umíme jen pomocí GEM, čemuž jsme se chtěli vyhnout
- umění je najít matici $\mathbb{H}$ tak, aby co nejlépe aproximovala $\mathbb{A}^{-1}$ ale byla snadno dosažitelná

Shrnutí

- **konvergence stacionárních metod**
  - $\rho(\mathbb{B}) < 1$ - nutná a postačující
  - $\|\mathbb{B}\| < 1$ - postačující
- apriorní a **aposteriorní** odhady chyb
  - $\|\mathbb{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b}\| / \|\vec{b}\| < \epsilon \approx 10^{-4}$
  - $\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}^{(k-1)}\| / \|\vec{b}\| < \epsilon \approx 10^{-4}$
- **předpodmínění**