Metody numeryczne

Układy równań liniowych, część II

Janusz Szwabiński

szwabin@ift.uni.wroc.pl

Układy równań liniowych, część II

1. Iteracyjne poprawianie rozwiązań
2. Metody iteracyjne rozwiązywania układów równań
   - Uwagi wstępne
   - Metoda Jacobiego
   - Metoda Gaussa-Seidla
   - Analiza błędów zaokrągleń
   - Metoda Czebyszewa
   - Nakłady obliczeń i warunki ich przerwania
3. Układy równań z macierzami rzadkimi

Literatura uzupełniająca

- S. Paszkowski, “Zastosowania numeryczne wielomianów i szeregów Czebyszewa”

Iteracyjne poprawianie rozwiązań (1)

Rozwiązanie układu równań

$$\mathbf{A}x = b$$

dowolną metodą dokładną obarczone jest pewnym błędem.

Wektor reszt

$$r = b - \mathbf{A}x$$

Iteracyjne poprawianie rozwiązań (2)

Przykład

$$\begin{pmatrix} 0,99 & 0,70 \\ 0,70 & 0,50 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 0,54 \\ 0,36 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \tilde{x} = \begin{pmatrix} 0,80 \\ -0,36 \end{pmatrix}$$

Arytmetyka zmiennopozycyjna o dwóch miejscach dziesiętnych w mantysie, z zaokrągleniami:

$$\begin{aligned} r(\tilde{x}) &= \begin{pmatrix} 0,54 \\ 0,36 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0,99 & 0,70 \\ 0,70 & 0,50 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,80 \\ -0,36 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 0,54 - 0,79 + 0,25 \\ 0,38 - 0,56 + 0,18 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Iteracyjne poprawianie rozwiązań (3)

Przykład (ciąg dalszy)

Ale dla $x_1 = (0,02; 0,74)^{\mathrm{T}}$ mamy również

$$
\begin{aligned}
r(x_1) &= \begin{pmatrix} 0,54 \\ 0,36 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0,99 & 0,70 \\ 0,70 & 0,50 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,02 \\ 0,74 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0,54 - 0,02 - 0,52 \\ 0,38 - 0,01 - 0,37 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},
\end{aligned}
$$

mimo że x_1 nie jest rozwiązaniem równania,

$$\|\tilde{x} - x_1\|_\infty = 1,1$$

Iteracyjne poprawianie rozwiązań (4)

Przykład (ciąg dalszy)

Arytmetyka z większą liczbą miejsc dziesiętnych w mantysie:

$$
\begin{aligned}
r(\tilde{x}) &= \begin{pmatrix} 0,54 \\ 0,36 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0,99 & 0,70 \\ 0,70 & 0,50 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,80 \\ -0,36 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0,54 - 0,792 + 0,252 \\ 0,38 - 0,56 + 0,18 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Iteracyjne poprawianie rozwiązań (5)

Przykład (ciąg dalszy)

$$
\begin{aligned}
r(x_1) &= \begin{pmatrix} 0,54 \\ 0,36 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0,99 & 0,70 \\ 0,70 & 0,50 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0,02 \\ 0,74 \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} 0,54 - 0,0198 - 0,518 \\ 0,38 - 0,014 - 0,37 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0,0022 \\ -0,004 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$\Rightarrow$ wektory reszt licz z możliwie dużą dokładnością

Iteracyjne poprawianie rozwiązań (6)

- dla znalezionego metodą dokładną x oblicz r
- wyznacz poprawkę δx taką, że

$$x + \delta x = \tilde{x}, \quad \tilde{x} \; - \; \text{rozwiązanie dokładne}$$

Wystarczy, że rozwiążemy układ

$$r = b - \mathbf{A}x = \mathbf{A}\tilde{x} - \mathbf{A}x = \mathbf{A}(\tilde{x} - x) = \mathbf{A}\delta x$$

Jeżeli dysponujemy rozkładem $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$, potrzebujemy:

- n^2 mnożeń
- $n^2 - n$ dodawań

Iteracyjne poprawianie rozwiązań (7)

Błędy zaokrągleń:

$\Rightarrow$ zamiast δx znaleźliśmy poprawkę przybliżoną $\delta x + \delta(\delta x)$

$\Rightarrow$ "musimy" liczyć dalej

Algorytm:

1. rozwiąż $\mathbf{A}x^{(1)} = b$ stosując rozkład $\mathbf{LU}$ macierzy $\mathbf{A}$,
2. oblicz $r^{(1)} = b - \mathbf{A}x^{(1)}$ (w podwójnej precyzji)
3. przerwij obliczenia, jeśli $\|r^{(1)}\|_\infty \leq \|\mathbf{A}x^{(1)}\|_\infty u$ (lub $\|r^{(1)}\|_\infty \leq \|b\|_\infty u$). Jeżeli nie , to ...
4. oblicz $\delta x^{(1)}$ i wyznacz $x^{(2)} = x^{(1)} + \delta x^{(1)}$,
5. oblicz $r^{(2)} = b - \mathbf{A}x^{(2)}$ i przejdź do punktu 3

$\Rightarrow$ wektor reszt rozwiązania rzędu $u\|b\|_\infty$

Metody iteracyjne

- wybierz dowolny wektor startowy $x^{(0)}$
- stopniowo ulepszaj ten wektor aż do uzyskania dostatecznie dokładnego rozwiązania interesującego Cię układu równań

Uwagi wstępne (1)

Definicja Promieniem spektralnym $\rho(\mathbf{A})$ macierzy $\mathbf{A}$ nazywamy liczbę

$$\rho(\mathbf{A}) = \max_{i=1,\ldots,n} |\lambda_i|,$$

przy czym λ_i są tutaj wartościami własnymi macierzy $\mathbf{A}$. Zachodzi

$$|\lambda_i| \leq \|\mathbf{A}\|_p \Rightarrow \rho(\mathbf{A}) \leq \|\mathbf{A}\|_p, \;\; p = 1, 2, \infty, E$$

Lemat 1 *Dla każdej liczby dodatniej* $\epsilon > 0$ *istnieje taka indukowana norma* $\|.\|_p$ *macierzy* $\mathbf{A}$*, że*

$$\|\mathbf{A}\|_p \leq \rho(\mathbf{A}) + \epsilon$$

Uwagi wstępne (2)

Twierdzenie 1 *Dla każdego rzeczywistego wektora x ciąg wektorów $\mathbf{A}x$, $\mathbf{A}^2x$, ... jest zbieżny do zera wtedy i tylko wtedy, gdy $\rho(\mathbf{A}) < 1$.*

Dowód Niech $\rho(\mathbf{A}) < 1$. Przyjmując

$$\epsilon = \frac{1 - \rho(\mathbf{A})}{2},$$

na mocy lematu 1 można wskazać taką normę $\|.\|_p$ macierzy $\mathbf{A}$, że

$$\|\mathbf{A}\|_p \leq \frac{1 + \rho(\mathbf{A})}{2} < 1.$$

Stąd wynika

$$\|\mathbf{A}^n x\|_p \leq \|\mathbf{A}\|_p^n \|x\|_p \to 0,$$

czyli $\mathbf{A}^n x \to 0$.

Uwagi wstępne (3)

Dowód (ciąg dalszy)

Przypuśćmy teraz, że $\rho(\mathbf{A}) \geq 1$ i że ciąg $\mathbf{A}x$, $\mathbf{A}^2x, \ldots$ jest zbieżny do zera dla dowolnego wektora rzeczywistego x. Niech λ będzie wartością własną macierzy $\mathbf{A}$ o największym module,

$$|\lambda| = \rho(\mathbf{A}) \geq 1.$$

Liczba λ może być zespolona, więc w ogólności odpowiada jej zespolony wektor własny v taki, że

$$\mathbf{A}v = \lambda v.$$

Niech $v = a + ib$, $\lambda^n = \alpha_n + i\beta_n$.

Uwagi wstępne (4)

Dowód (ciąg dalszy)

$$|\lambda^n| = \sqrt{\alpha_n^2 + \beta_n^2} \geq 1 \quad \Rightarrow \alpha_n^2 + \beta_n^2 \geq 1$$

Mamy

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^n v &= \mathbf{A}^n a + i\mathbf{A}^n b \\ \mathbf{A}^n v &= \lambda^n v = (\alpha_n a - \beta_n b) + i(\beta_n a + \alpha_n b), \end{aligned}$$

więc

$$\mathbf{A}^n a = \alpha_n a - \beta_n b, \quad \mathbf{A}^n b = \beta_n a + \alpha_n b.$$

Uwagi wstępne (5)

Dowód (ciąg dalszy)

Stąd wynika

$$\|\mathbf{A}^n a\|_2^2 + \|\mathbf{A}^n b\|_2^2 = (\alpha_n^2 + \beta_n^2)(\|a\|^2 + \|b\|^2) \geq (\|a\|^2 + \|b\|^2) > 0$$

$\Rightarrow$ ciągi $\mathbf{A}^n a$ oraz $\mathbf{A}^n b$ nie mogą być równocześnie zbieżne do zera

$\Rightarrow$ istnieje wektor, dla którego ciąg $\mathbf{A}x$, $\mathbf{A}^2 x$, $\ldots$ nie jest zbieżny do zera

$\Rightarrow$ sprzeczność $\blacksquare$

Uwagi wstępne (6)

Dla dowolnego wektora $x^{(0)}$ definiujemy ciąg

$$x^{(i+1)} = \mathbf{M}x^{(i)} + w, \quad i = 0, 1, \ldots,$$

$\mathbf{M}$	-	pewna macierz kwadratowa
w	-	wektor

Twierdzenie 2 *Powyższy ciąg przy dowolnym wektorze $x^{(0)}$ jest zbieżny do jedynego punktu granicznego wtedy i tylko wtedy, gdy*

$$\rho(\mathbf{M}) < 1.$$

Uwagi wstępne (7)

Dowód

$$\begin{aligned} x^{(i+1)} &= \mathbf{M}x^{(i)} + w = \mathbf{M}(\mathbf{M}x^{(i-1)} + w) + w = \ldots \\ &= \mathbf{M}^{(i+1)}x^{(0)} + (\mathbf{M}^{(i)}w + \mathbf{M}^{(i-1)}w + \ldots + w). \end{aligned}$$

Załóżmy najpierw, że $\rho(\mathbf{M}) < 1$. Na mocy twierdzenia 1 zachodzi

$$\lim_{i\to\infty} \mathbf{M}^{(i+1)}x^{(0)} = 0.$$

Ponadto, szereg $w + \mathbf{M}w + \ldots + \mathbf{M}^i w + \ldots$ jest zbieżny, ponieważ spełnia warunek Cauchy'ego zbieżności szeregów.

Uwagi wstępne (8)

Dowód (ciąg dalszy)

Załóżmy, że $\rho(\mathrm{M}) \geq 1$. Jeśli $x^{(i+1)} \to \tilde{x}$ przy dowolnym $x^{(0)}$, to $\tilde{x}$ musi spełniać równanie

$$\tilde{x} = \mathbf{M}\tilde{x} + w.$$

Wprowadźmy wektory

$$e^{(i+1)} = x^{(i+1)} - \tilde{x}.$$

Powinny one dążyć do zera. Z drugiej jednak strony zachodzi

$$e^{(i+1)} = \mathbf{M}e^{(i)}, \quad e^{(0)} = x^{(0)} - \tilde{x} \quad \Rightarrow e^{(i+1)} = \mathbf{M}^{(i+1)}e^{(0)}$$

Zgodnie z twierdzeniem 1 możemy wybrać wektor $e^{(0)}$ (tzn. $x^{(0)}$) taki, że $e^{(i+1)}$ nie dąży do zera. ∎

Uwagi wstępne (9)

Lemat 2 *Jeżeli norma macierzy kwadratowej* $\mathbf{M}$ *spełnia warunek*

$$\|\mathbf{M}\|_p < 1,$$

to macierz $\mathbf{I} + \mathbf{M}$ *jest nieosobliwa.*

Dowód Gdyby macierz $\mathbf{I} + \mathbf{M}$ była osobliwa, to istniałby niezerowy wektor x taki, że $(\mathbf{I} + \mathbf{M})x = 0$. Ale wówczas $x = -\mathbf{M}x$ i otrzymalibyśmy

$$\|x\|_p = \|-\mathbf{M}x\|_p \leq \|\mathbf{M}\|_p \|x\|_p,$$

czyli sprzeczność (bo $\|\mathbf{M}\|_p < 1$). ∎

Uwagi wstępne (10)

Lemat 1 i lemat 2

$\Rightarrow \ \rho(\mathbf{M}) < 1 \rightarrow x = \mathbf{M}x + w$ ma rozwiązanie jednoznaczne

Metody iteracyjne - sposób konstrukcji:

dla układu $\mathbf{A}x = b$ dobierz macierz $\mathbf{M}$ tak, aby:

- $\rho(\mathbf{M}) < 1$, tzn. ciąg

$$x^{(i+1)} = \mathbf{M}x^{(i)} + w, \quad i = 0, 1 \ldots$$

  był zbieżny

- aby spełniony był warunek zgodności

$$\tilde{x} = \mathbf{M}\tilde{x} + w, \quad \tilde{x} \text{ - dokładne rozwiązanie}$$

Uwagi wstępne (11)

Teoretycznie wystarczy

- wziąć dowolną macierz $\mathbf{M}$ taką, że $\rho(\mathbf{M}) < 1$
- wyliczyć w ze wzoru

$$w = (\mathbf{I} - \mathbf{M})\mathbf{A}^{-1}b$$

jednak wymagałoby to wyliczenia macierzy $\mathbf{A}^{-1}$

Uwagi wstępne (12)

Niech

$$w = \mathbf{N}b, \quad (\mathbf{N} \text{ - pewna macierz kwadratowa})$$

Z warunku zgodności

$$\tilde{x} = \mathbf{M}\tilde{x} + w \quad \Rightarrow (\mathbf{A}^{-1} - \mathbf{N} - \mathbf{M}\mathbf{A}^{-1})b = 0 \quad \Rightarrow \mathbf{M} = \mathbf{I} - \mathbf{N}\mathbf{A}$$

Stąd

$$x^{(i+1)} = (\mathbf{I} - \mathbf{N}\mathbf{A})x^{(i)} + \mathbf{N}b$$

$\Rightarrow$ rozwiązanie istnieje, jeżeli tylko

$$\rho(\mathbf{I} - \mathbf{N}\mathbf{A}) < 1$$

Uwagi wstępne (13)

Jak testować efektywność?

- ilość niezbędnych działań
- potrzebna pamięć
- szybkość zmian wektora błędu (do zera!)

$$e^{(i)} = x^{(i)} - \tilde{x}$$

Uwaga!

- osiągnięcie zadowalającej dokładności w rozsądnym czasie nie zawsze bywa możliwe

Uwagi wstępne (14)

Przykład

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 1 & & & \\ & \frac{1}{2} & 1 & & \\ & & \frac{1}{2} & \ddots & \\ & & & \ddots & 1 \\ & & & & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, w = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ \vdots \\ -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \Rightarrow \tilde{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$\rho(\mathbf{M}) = \frac{1}{2} \Rightarrow$ dla dowolnego $x^{(0)}$ metoda iteracyjna jest zbieżna, a mimo to dla $x^{(0)} = 0$:

$$\|e^{(0)}\|_\infty = 1, \ \|e^{(1)}\|_\infty = \frac{3}{2}, \ \|e^{(2)}\|_\infty = \frac{9}{4}, \ldots,$$

Uwagi wstępne (15)

Błędy zaokrągleń

$\Rightarrow$ w skrajnym możemy otrzymać

$$x^{(i+1)} = x^{(0)}$$

$\Rightarrow$ numeryczne rozwiązanie iteracyjne nie zawsze możliwe

Metoda Jacobiego (1)

Rozważmy układ

$$\mathbf{A}x = b,$$

przy czym

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$$

$\mathbf{L}$	-	macierz poddiagonalna
$\mathbf{D}$	-	macierz diagonalna
$\mathbf{U}$	-	macierz naddiagonalna

Przykład

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 \\ 7 & 8 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 6 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Metoda Jacobiego (2)

$$x^{(i+1)} = (\mathbf{I} - \mathbf{NA})x^{(i)} + \mathbf{N}b$$

Niech

$$\mathbf{N} = \mathbf{D}^{-1}$$

Wówczas

$$\begin{aligned} \mathbf{M_J} &= \mathbf{I} - \mathbf{NA} = \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}\mathbf{A} \\ &= \mathbf{I} - \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}) = -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U}) \end{aligned}$$

Wzór Jacobiego

$$\mathbf{D}x^{(i+1)} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})x^{(i)} + b, \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

Metoda Jacobiego (3)

Główna przekątna zawiera zera

$\Rightarrow$ metoda nie jest niezawodna

$\Rightarrow$ zmień kolejność równań w układzie $\mathbf{A}x = b$

W tym celu

1. spośród kolumn z elementem zerowym na diagonali wybierz tę z największą liczbą zer;
2. w kolumnie tej wybierz element o największym module; tak przestaw wiersze, aby znalazł się on na głównej przekątnej; pomiń ten wiersz w dalszych rozważaniach; powróć do punktu 1

Metoda Jacobiego (4)

Przykład

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \\ 7 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 7 & 3 & 0 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 7 & 3 & 0 & 1 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \\ 2 & 1 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Metoda Jacobiego (5)

Uwaga:

- zamiana wierszy w macierzy gwarantuje jedynie, że będzie istniała macierz $\mathbf{D}^{-1}$
- spełnienie warunku zbieżności

$$\rho(-\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U})) < 1$$

  nie jest gwarantowane!

Metoda Jacobiego jest na pewno zbieżna, jeśli macierz $\mathbf{A}$ jest

- silnie diagonalnie dominująca
- silnie diagonalnie dominująca kolumnowo

Metoda Gaussa–Seidla (1)

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

Niech

$$\mathbf{N} = (\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{M}_{GS} = -(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}$$

Stąd

$$\mathbf{D}x^{(i+1)} = -\mathbf{L}x^{(i+1)} - \mathbf{U}x^{(i)} + b, \quad i = 0, 1, 2, \ldots$$

- przy obliczaniu $x_1^{(i+1)}$ po prawej stronie nie wystąpi żadna współrzędna wektora $x^{(i+1)}$
- przy obliczaniu $x_2^{(i+1)}$ prawa strona równości będzie zależała tylko od $x_1^{(i+1)}$ itd.

Metoda Gaussa–Seidla (2)

Metoda nie jest niezawodna

$\Rightarrow$ w razie konieczności przestaw wiersze

Warunek zbieżności

$$\rho(\mathbf{M}_{GS}) = \rho(-(\mathbf{D}+\mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}) < 1$$

gwarantowany, jeśli macierz $\mathbf{A}$ układu równań jest:

- symetryczna, dodatnio określona;
- silnie diagonalnie dominująca;
- silnie diagonalnie dominująca kolumnowo

Analiza błędów zaokrągleń (1)

Niech

$\delta^{(i)}$ - błąd zaokrągleń w iteracji i

$\Rightarrow$ w każdej iteracji zamiast $\mathbf{M}x^{(i)} + w$ obliczamy

$$\mathbf{M}x^{(i)} + w + \delta^{(i)}$$

Stąd wynika

$$x^{(i+1)} = \mathbf{M}^{i+1}x^{(0)} + \mathbf{M}^i w + \ldots + w + \delta^{(i)} + \mathbf{M}\delta(i-1) + \ldots + \mathbf{M}^i\delta^{(0)}$$

Łączny błąd zaokrągleń wynosi

$$\tilde{x}^{(i+1)} - x^{(i+1)} = \delta^{(i)} + \mathbf{M}\delta^{(i-1)} + \ldots + \mathbf{M}^i\delta^{(0)}$$

Analiza błędów zaokrągleń (2)

Jeżeli algorytm iteracyjny jest zbieżny i indeks iteracji jest dostatecznie duży, możemy przyjąć

$$\frac{1}{2}\|\tilde{x}\| < \|x^{(j)}\| < 2\|\tilde{x}\|$$

Stąd (dla $\tilde{x} \neq 0$)

$$\frac{\|\tilde{x}^{(i+1)} - x^{(i+1)}\|}{\|x^{(i+1)}\|} \leq \frac{2}{\|\tilde{x}\|}(\|\delta^{(i)}\| + \|\mathbf{M}\| \cdot \|\delta^{(i-1)}\| + \ldots + \|\mathbf{M}\|^i \cdot \|\delta^{(0)}\|)$$

czyli

$$\frac{\|\tilde{x}^{(i+1)} - x^{(i+1)}\|}{\|x^{(i+1)}\|} \leq \frac{2\kappa}{\|\tilde{x}\|}(1 + \|\mathbf{M}\| + \ldots + \|\mathbf{M}\|^i)$$

$$\|\delta^{(j)}\| < \kappa, \quad j = 0, 1, 2, \ldots, i$$

Analiza błędów zaokrągleń (3)

Jeśli $\|\mathbf{M}\| < 1$, to

$$\frac{\|\tilde{x}^{(i+1)} - x^{(i+1)}\|}{\|x^{(i+1)}\|} < \frac{1}{1 - \|\mathbf{M}\|} \frac{2\kappa}{\|\tilde{x}\|}$$

Jeśli macierz układu jest silnie diagonalnie dominująca:

$$\frac{\|\tilde{x}^{(i+1)} - x^{(i+1)}\|_\infty}{\|x^{(i+1)}\|_\infty} \leq \frac{1}{1 - \|\mathbf{M}_{GS}\|_\infty} \frac{12\alpha}{1 - \alpha}$$

$$\alpha = \epsilon O(2n^2) \|\mathbf{D}\|_\infty \|\mathbf{D}^{-1}\|_\infty$$

$\Rightarrow$ w porównaniu z eliminacją Gaussa stosując metodę Gaussa–Seidla można zyskać na dokładności, jeśli

$$\|\mathbf{D}\|_\infty \|\mathbf{D}^{-1}\|_\infty \ll K_\infty$$

Metoda Czebyszewa (1)

Niech

$\mathbf{A}$ - macierz symetryczna i dodatnio określona

Chcemy wybrać macierz $\mathbf{N}$ tak, aby spełniony był warunek

$$\rho(\mathbf{I} - \mathbf{NA}) < 1,$$

tzn. aby zbieżność rodziny iteracyjnej

$$x^{(i+1)} = (\mathbf{I} - \mathbf{NA})x^{(i)} + \mathbf{N}b$$

do rozwiązania układu $\mathbf{A}x = b$ była gwarantowana.

Metoda Czebyszewa (2)

Załóżmy, że $\mathbf{N}_s$ jest wielomianem macierzowym $W(\mathbf{A})$ stopnia $(s-1)$

$\Rightarrow$ $\mathbf{M}_s$ jest wielomianem stopnia s postaci

$$P_s(t) = 1 - W(t)t \ \ (\text{dla } t = \mathbf{A})$$

$\mathbf{A}$ jest symetryczna i ma rzeczywiste, dodatnie wartości własne $a_1, \ldots, a_n$

$\Rightarrow$ wartości własne macierzy $\mathbf{M}_s$ spełniają warunek

$$m_i = P_s(a_i), \ \ i = 1, \ldots, n$$

Metoda Czebyszewa (3)

Niech

$$\alpha \leq a_1 < \ldots < a_n \leq \beta$$

Jeśli zachodzi

$$|P_s(t)| < 1, \;\; t \in \langle \alpha, \beta \rangle$$

to

$$\rho(\mathbf{M}_s) < 1$$

Metoda Czebyszewa (4)

Szukamy wielomianu $W(t)$ stopnia $(s-1)$ takiego, aby wyrażenie

$$\max_{t\in\langle\alpha,\beta\rangle} |1 - W(t)t|$$

było najmniejsze z możliwych

$$\Rightarrow \quad P_s(t) = \frac{T_s\left(\frac{2t-(\beta-\alpha)}{\beta-\alpha}\right)}{T_s\left(-\frac{\beta+\alpha}{\beta-\alpha}\right)}$$

$T_s(x) = \cos(s \arccos x)$ (T_s - wielomian Czebyszewa)

Metoda Czebyszewa (5)

Przykład $s = 1$:

$$P_1(t) = \frac{2}{\beta + \alpha} t, \quad \mathbf{M}_1 = \mathbf{I} - \frac{2}{\beta + \alpha} \mathbf{A}, \quad \mathbf{N_1} = \frac{2}{\beta + \alpha} \mathbf{I},$$

oraz

$$\rho(\mathbf{M}_1) \leq \frac{\beta - \alpha}{\beta + \alpha} < 1$$

$\Rightarrow$ możemy obliczyć macierze $\mathbf{M}_s$ i $\mathbf{N}_s$, ale ...

$\Rightarrow$ metoda nieekonomiczna (wyznaczanie kolejnych potęg macierzy)

Metoda Czebyszewa (6)

Oznaczmy przez $y^{(1)}, \ldots, y^{(s)}$ wektory $x^{(i+1)}$, które otrzymamy stosując wielomiany stopnia $1, 2, \ldots, s$ ($k = 1, 2, \ldots, s-1$):

$$y^{(0)} = x^{(0)}, \;\; y^{(1)} = x^{(i)} - \frac{2}{\beta + \alpha}(\mathbf{A}x^{(i)} - b)$$

$$y^{(k+1)} = y^{(k)} + \omega_k \omega_{k-1}(y^{(k)} - y^{(k-1)}) - \frac{2}{\beta + \alpha}(1 + \omega_k \omega_{k-1}) - (\mathbf{A}y^{(k)} - b)$$

$$\omega_0 = \frac{\beta - \alpha}{\beta + \alpha}, \;\; \omega_{k+1} = \frac{1}{2\frac{\beta+\alpha}{\beta-\alpha} - \omega_k}$$

Metoda Czebyszewa (7)

Rozwiązanie układu $\mathbf{A}x = b$ (algorytm):

1. dla $i = 0$ kładziemy $x^{(-1)} = 0$ oraz obliczamy

$$\omega_0 = \frac{\beta - \alpha}{\beta + \alpha}, \quad c = \frac{2}{\beta + \alpha}, \quad L = 2\frac{\beta + \alpha}{\beta - \alpha}$$

2. dla $k = 0$ kładziemy $x^{(i)} = x_0$, oraz $\omega_{i-1} = 0$ i $\omega_i = \omega_0$,
3. obliczamy

$$\begin{aligned} x^{(i+1)} &= x^{(i)} + \omega_i\omega_{i-1}(x^{(i)} - x^{(i-1)}) - c(1 + \omega_i\omega_{i-1}) \\ &- (\mathbf{A}x^{(i)} - b) \\ \omega_{i+1} &= \frac{1}{L - \omega_i} \end{aligned}$$

4. zwiększamy k i i o jeden. Jeśli $k < s$ to wracamy do kroku 3, jeśli $k \geq s$, przyjmujemy $x_0 = x^{(i)}$ i wracamy do kroku 2

Metoda Czebyszewa (8)

Twierdzenie 3 *Jeżeli* $\mathbf{A}$ *jest macierzą symetryczną dodatnio określoną, której wartości własne leżą w przedziale* $\langle \alpha, \beta \rangle$ *(*$0 < \alpha < \beta$*), to dla dowolnego wektora początkowego* $x^{(0)}$ *ciąg* $x^{(1)}, x^{(2)}, \ldots$ *generowany przez algorytm Czebyszewa przy braku błędów zaokrągleń dąży do rozwiązania równania* $\mathbf{A}x = b$*.*

Metoda Czebyszewa (9)

Dowód Przyjrzyjmy się najpierw wektorom $x^{(0)}$, $x^{(s)}$, $x^{(2s)}$, $\ldots$, dla których następuje powrót do kroku 2:

$$x^{((k+1)s)} = \mathbf{M}_s x^{(ks)} + \mathbf{N}_s b.$$

Macierze $\mathbf{M}_s$ i $\mathbf{N}_s$ spełniają warunek zgodności, więc

$$\tilde{x} = \mathbf{M}_s \tilde{x} + \mathbf{N}_s b.$$

Odejmując powyższe równania stronami otrzymamy

$$e^{((k+1)s)} = \mathbf{M}_s e^{(ks)},$$

gdzie $e = x - \tilde{x}$. Stąd

$$e^{(ks)} = \mathbf{M}_s^k e^{(0)}.$$

Metoda Czebyszewa (10)

Dowód (ciąg dalszy)

Niech teraz $i = ks + p$ dla $1 \leq p \leq s$. Zachodzi

$$x^{(i)} = \mathbf{M}_p x^{(ks)} + N_p b,$$

czyli

$$e^{(i)} = \mathbf{M}_p e^{(ks)} = \mathbf{M}_p \mathbf{M}_s^k e^{(0)}.$$

Ponieważ

$$\|\mathbf{M}_p\|_2 \leq \|\mathbf{M}_1\|_2 \leq \frac{\beta - \alpha}{\beta + \alpha},$$

oraz

$$\|\mathbf{M}_s\|_2 \leq \|\mathbf{M}_1\|_2 \leq \frac{\beta - \alpha}{\beta + \alpha},$$

więc $\|e^{(i)}\|_2 \longrightarrow 0$. ∎

Metoda Czebyszewa (11)

Własności

- im większe s tym lepsza zbieżność
- w idealnym przypadku najlepiej byłoby wziąć $s = \infty$ (brak odświeżania)
- ze względu na błędy zaokrągleń bierze się s duże, ale skończone

Metoda Czebyszewa (12)

Błąd (w każdej iteracji)

$$\frac{\|\delta^{(i)}\|_2}{\|x^{(i)}\|_2} \leq \epsilon \left(55 + \frac{\eta}{\epsilon}(8k + 16)\right)$$

η - precyzja, z jaką obliczamy $\mathbf{A}x^{(i)} - b$

$$k \leq (n+1)\sqrt{n}$$

Nakłady obliczeń i warunki ich przerwania (1)

- około n^2 mnożeń w każdej iteracji
- liczba iteracji $\gg n$ potrzebna do osiągnięcia dużej dokładności

$\Rightarrow$ po około n iteracjach nakład obliczeń porównywalny z metodami dokładnymi

$\Rightarrow$ w przypadku ogólnym metoda nieefektywna

Nakłady obliczeń i warunki ich przerwania (2)

Przykład

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{3}{4} \\ \frac{3}{4} & 1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 448 \\ 448 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad x = \begin{pmatrix} 256 \\ 256 \end{pmatrix}$$

- eliminacja Gaussa: 6 mnożeń
- metoda Gaussa–Seidla: po 8 iteracjach (32 mnożenia)

$$\|x^{(8)} - \tilde{x}\| > 0,1$$

Nakłady obliczeń i warunki ich przerwania (3)

Testy stopu (Δ - żądana dokładność)

1. $\|x^{(i+1)} - x^{(i)}\| < \Delta$
2. $\frac{1}{\|b\|}\|\mathbf{A}x^{(i+1)} - b\| < \Delta$

Jeżeli norma macierzy $\mathbf{A}$ jest mała, to reszta

$$\|\mathbf{A}x^{(i+1)} - b\| = \|\mathbf{A}(x^{(i+1)} - \tilde{x})\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|x^{(i+1)} - \tilde{x}\|$$

może być mała, mimo dużego odchylenia wektora $x^{(i+1)}$ od rozwiązania dokładnego $\tilde{x}$

Nakłady obliczeń i warunki ich przerwania (4)

$$\|x^{(i+1)}-x^{(i)}\| = \|e^{(i+1)}-e^{(i)}\| = \|\mathbf{M}e^{(i)}-e^{(i)}\| = \|(\mathbf{M}-\mathbf{I})e^{(i)}\|,$$

$\Rightarrow$ mimo dużego błędu $e^{(i)}$, $x^{(i+1)}$ i $x^{(i)}$ mogą się mało różnić, gdy norma macierzy $\mathbf{M}-\mathbf{I}$ jest mała

$$\|\mathbf{I}-\mathbf{M}\| \geq \rho(\mathbf{I}-\mathbf{M}) = 1-\rho(\mathbf{M}),$$

$\Rightarrow$ z sytuacją taką mamy do czynienia, gdy $\rho(\mathbf{M})$ jest bliskie 1 (wolna zbieżność algorytmu)

Układy równań z macierzami rzadkimi (1)

Definicja Macierz $\mathbf{A}$ układu $\mathbf{A}x = b$ nazywamy macierzą rzadką, jeżeli w każdym równaniu (a przynajmniej w wielu z nich) liczba niewiadomych jest dużo mniejsza niż liczba wszystkich niewiadomych n.

$\Rightarrow$ rezerwowanie n^2 komórek pamięci dla macierzy układu jest bardzo nieekonomiczne

Układy równań z macierzami rzadkimi (2)

Organizacja pamięci:

1. zapamiętujemy kolumnami niezerowe elementy, np.: a_{11}, a_{21}, a_{12}, a_{22}, a_{32}, a_{23}, a_{33}, a_{43}, a_{34}, a_{44}, oraz w oddzielnych tablicach numery wierszy, tu: 1, 2, 1, 2, 3, 2, 3, 4, 3, 4, oraz znaczniki kolumn (łącznie z nieistniejącą $(n+1)$–szą), tu: 1,3,6,9,11,
2. jak powyżej, lecz zamiast zapamiętywać numery wierszy, zapamiętujemy tylko pierwszy i ostatni w każdej kolumnie oraz dodatkowo słowami bitowymi położenie niezerowych elementów, np. dla kolumny a_{12}, a_{32}, a_{43}, a_{72}, a_{83} należy zapamiętać liczby 1 i 8 oraz kod 011001, wskazujący elementy a_{32}, a_{43}, a_{72},

Układy równań z macierzami rzadkimi (3)

3. elementy macierzy zapisujemy w dowolnej kolejności, dołączając do nich informacje o położeniu sąsiednich elementów w ich wierszach i kolumnach lub dodatkowe informacje, np. położenie ostatniego elementu w kolumnie.

Układy równań z macierzami rzadkimi (4)

Metody dokładne

- brakuje skutecznych metod wyboru elementu podstawowego, które z jednej strony gwarantowałyby niezawodność i stabilność numeryczną, a z drugiej nie powodowały pojawienia się dużej liczby nowych niezerowych elementów
- wyjątki:
  - macierze trójdiagonalne, diagonalnie dominujące kolumnowo
  - macierze wstęgowe, diagonalnie dominujące kolumnowo
  - macierze wstęgowe, symetryczne i dodatnio określone

Układy równań z macierzami rzadkimi (5)

Metody iteracyjne

- nakład obliczeń dużo mniejszy niż w przypadku ogólnym

  $\Rightarrow$ możliwa duża liczba iteracji

  $\Rightarrow$ możliwa zadowalająca dokładność

- nie trzeba zmieniać położenia elementów macierzy $\mathbf{A}$