

§4. Итерационные методы решения СЛАУ

4.1 Одношаговые итерационные методы. Основные понятия

Одним из наиболее эффективных приемов решения СЛАУ (1)

$$Ax = f$$

высокого порядка, в частности, СЛАУ, возникающие при разностной аппроксимации дифференциальных уравнений (как правило с ленточными матрицами), являются *итерационные* методы.

Если для получения приближения решения (1) на очередной итерации (на очередном шаге итерационного процесса) используется лишь предыдущее значение x , то такой итерационный метод называется *одношаговым* (или *двуслойным*).

Мы ограничимся рассмотрением одношаговых итерационных методов, каноническая форма записи которых представляется в виде:

$$B_{n+1} \frac{x_{n+1} - x_n}{\tau_{n+1}} + Ax_n = f, \quad n = 0, 1, \dots \quad (16)$$

$$x_0 = x^0.$$

Здесь B_{n+1} ($\det B_{n+1} \neq 0, \forall n$) и $\tau_{n+1} > 0$ — итерационные матрица и параметр. Основное внимание мы уделим *стационарным* итерационным методам, т.е. $B_{n+1} = B; \tau_{n+1} = \tau > 0$. Если $B \neq E$, то метод называется *неявным*. Точность итерационного метода характеризуется величиной нормы *погрешности* решения на n -ой итерации

$$z_n = x_n - x; \quad x_n = x + z_n; \quad (16)$$

где x — решение (1), z_n — погрешность n -ой итерации.

Поскольку (16) линейное относительно x уравнение, то погрешность z_n удовлетворяет однородному уравнению:

$$B_{n+1} \frac{(x + z_{n+1}) - (x + z_n)}{\tau_{n+1}} + A(x + z_n) = f \Leftrightarrow B_{n+1} \frac{z_{n+1} - z_n}{\tau_{n+1}} + Az_n = 0. \quad (17)$$

Для неявного итерационного метода (16) естественно потребовать, чтобы решение задачи для x_{n+1}

$$B_{n+1}x_{n+1} = B_{n+1}x_n + \tau_{n+1}(f - Ax_n) \equiv F_n$$

требовало бы меньшего объема вычислений, чем прямое решение $Ax = f$.

Запишем (16) в форме *метода последовательных приближений* (МПП):

$$x_{n+1} = B_{n+1}^{-1}(B_{n+1} - \tau_{n+1}A)x_n + B_{n+1}^{-1}\tau_{n+1}f = \left. \begin{array}{l} \text{для стационар-} \\ \text{ного} \\ \text{итерационного} \\ \text{метода} \end{array} \right| =$$

$$= B^{-1}(B - \tau A)x_n + \tau B^{-1}f \equiv Cx_n + g \quad (16^*)$$

где $C = E - \tau B^{-1}A$ — матрица перехода к очередной итерации.

4.2 Представление основных (простейших) итерационных методов

Напомним еще раз, что мы рассматривали только *стационарные итерационные методы*

а) *метод релаксации*

$$\frac{x_{n+1} - x_n}{\tau} + Ax_n = f, \quad n = 0, 1, \dots \quad (18)$$

$$x_0 = x^0.$$

Итерационная матрица $B = E$ и $\tau > 0$ — явный, стационарный метод. Если $\tau = \tau_{n+1} > 0$, то метод называется *методом Рундсона*. Запишем решение

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{x}_n - \tau(A\vec{x}_n - \vec{f}). \quad (18^*)$$

б) Группа итерационных методов: *метод Якоби, метод Зейделя, метод верхней релаксации*.

Все они основаны на специальном представлении матрицы A :

$$A = A_L + D + A_U,$$

где обозначено

$$(A_L)_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & j < i \\ 0, & j \geq i \end{cases} \quad (A_U)_{ij} = \begin{cases} 0_{ij}, & j \leq i \\ a_{ij}, & j > i \end{cases} \quad D = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn}).$$

1) *метод Якоби*. Роль итерационной матрицы B выполняет матрица D , $B = D$; $\tau = 1$ (для канонической формы метода), тогда

$$D\vec{x}_{n+1} = D\vec{x}_n - (A\vec{x}_n - \vec{f}). \quad (19)$$

Хотя метод и *явный*, но, поскольку матрица D — диагональная, легко записать решение

$$(\vec{x}_{n+1})_i = (\vec{x}_n)_i - \frac{1}{a_{ii}}(A\vec{x}_n - \vec{f})_i, \quad i = \overline{1, N} \quad (19^*)$$

$a_{ii} \neq 0$ по допущению поскольку мы считаем, что B — невырожденная матрица; N — размерность вектора \vec{x} .

2) *Метод Зейделя*. Полагаем $B = (A_L + D)$ — нижняя треугольная часть матрицы A . Канонический вариант метода получается при $\tau = 1$, тогда:

$$(A_L + D)(\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n) = -(A\vec{x}_n - \vec{f}), \quad (20)$$

Хотя метод Зейделя и *явный*, но $(A_L + D)$ легко обратима:

$$(\vec{x}_{n+1})_i = \frac{1}{a_{ii}} \left\{ -(A_U\vec{x}_n - \vec{f})_i - \sum_{k=1}^{i-1} (A_L)_{ik}(\vec{x}_{n+1})_k \right\}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (20^*)$$

3) *Метод верхней релаксации*. Этот метод обобщает метод Зейделя

$$(D + \omega A_L) \frac{\vec{x}_{n+1} - \vec{x}_n}{\omega} + A\vec{x}_n = \vec{f},$$

Итерационная матрица $B = D + \omega A_L$ также нижняя треугольная матрица; параметр $\tau = \omega > 0$ в канонической форме метода.

$$(D + \omega A_L)\vec{x}_{n+1} = (D + \omega A_L)\vec{x}_n - \underbrace{\omega A\vec{x}_n}_{\text{верхн. треуг. матрица}} + \omega \vec{f} = - \left\{ \underbrace{(\omega A - D - \omega A_L)}_{\text{верхн. треуг. матрица}} \vec{x}_n - \omega \vec{f} \right\}. \quad (21)$$

Решение дается формулой

$$(\vec{x}_{n+1})_i = \frac{1}{a_{ii}} \left\{ \left(-[\omega A_U + (\omega - 1)D]\vec{x}_n + \omega \vec{f} \right)_i - \sum_{k=1}^{i-1} (\omega A_L)_{ik} (\vec{x}_{n+1})_k \right\}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (21^*)$$

4.3 Сходимость итерационных методов

1) Используем общую формулу (16*) метода последовательных приближений

$$\begin{aligned} x_n = Cx_{n-1} + g &= \begin{vmatrix} C = E - \tau B^{-1}A \\ g = \tau B^{-1}f \end{vmatrix} = C(Cx_{n-2} + g) + g = C^2x_{n-2} + (E + C)g = \dots = \\ &= C^n x_0 + (E + C + \dots + C^{n-1})g. \end{aligned}$$

Это тождество и для сходимости $\{\vec{x}_n\}$ (16*) необходима и достаточна сходимость соответствующего степенного матричного ряда:

$$\sum_{n=0}^{\infty} C^n = E + C + C^2 + \dots + C^n + \dots$$

Сформулируем без доказательства теорему о сходимости матричных рядов:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n C^n = \alpha_0 E + \alpha_1 C + \alpha_2 C^2 + \dots + \alpha_n C^n + \dots \quad (*)$$

Для этого рассмотрим *производящий* ряд

$$\sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \lambda^n. \quad (**)$$

Теорема 1. Для сходимости матричного степенного ряда (*) необходимо и достаточно чтобы все собственные значения матрицы C принадлежали области сходимости производящего ряда (**),

$$\lambda_i(C) \in (-R; R), \quad \forall i,$$

где $1/R = \overline{\lim}_{n \rightarrow \infty} |\alpha_n|^{1/n}$.

Теперь нетрудно сформулировать

Теорема 2. Для сходимости метода последовательных приближений (16*) при

произвольном выборе \vec{x}_0 необходимо и достаточно, чтобы все собственные значения матрицы перехода C удовлетворяли бы условию $|\lambda_i| < 1, \forall i$.

При этом, в силу необходимого условия сходимости ряда (*): $C^n \rightarrow 0$, а

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} C^n &= \left| \begin{array}{l} \text{сходится} \\ \text{и даёт} \end{array} \right| = (E - C)^{-1} = (\tau B^{-1} A)^{-1} = A^{-1} \cdot (\tau B^{-1})^{-1} = \\ &= A^{-1} B \frac{1}{\tau} \Rightarrow \left(\sum_{n=0}^{\infty} C^n \right) \vec{g} \Rightarrow A^{-1} B \frac{1}{\tau} (\tau B^{-1} f) = A^{-1} f = \vec{x}. \end{aligned}$$

Замечания:

1) $S_n = \sum_{i=0}^n C^i$, если сходится, то к $(E - C)^{-1}$. Действительно

$$(E - C) \cdot S_n = (E + C + \dots + C^n) - (C + \dots + C^{n+1}) = E - C^{n+1} \Rightarrow E.$$

2) Имея возможность оценить собственные значения λ_i через норму матрицы C получаем достаточные условия сходимости метода последовательных приближений (16*). Напомним, для собственного значения λ справедливо

$$Cx = \lambda x \Rightarrow \|Cx\| = |\lambda| \cdot \|x\|,$$

но

$$\|Cx\| \leq \|C\| \cdot \|x\| \Leftrightarrow |\lambda| \leq \|C\|.$$

Достаточно выполнения в любой норме условия $\|C\| < 1$, что обеспечивает сходимость метода последовательных приближений (в соответствующей согласованной норме)

$$\begin{aligned} \text{в равномерной} & \quad - \quad \max_i \left(\sum_j |c_{ij}| \right) < 1 \\ \text{норме} & \\ \text{в 1-норме} & \quad - \quad \max_j \left(\sum_i |c_{ij}| \right) < 1 \\ & \\ \text{в евклидовой} & \quad - \quad \left(\sum_{ij} |c_{ij}|^2 \right)^{1/2} < 1. \end{aligned} \tag{22}$$

2) Дальнейшее изучение сходимости итерационных методов продолжим для случая, когда A — симметричная, положительно определенная матрица.

Напомним:

- Для вещественной матрицы A неравенство $A > 0$ означает:

$$(Ax, x) > 0, \quad \forall x \in \mathcal{H}, \quad x \neq 0.$$

Из неравенства $A > 0$ следует существование такого положительного $\delta > 0$, что $(Ax, x) \geq \delta \|x\|^2$, т.е. $A \geq \delta \cdot E$. Действительно:

1) если A симметричная матрица и $A > 0$, то все её собственные значения положительны, их можно упорядочить $0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n$ и имеет место неравенство:

$$\lambda_1 E \leq A \leq \lambda_n E.$$

В качестве δ можно выбрать $\min_i \lambda_i$.

2) если $A > 0$ несимметричная матрица, то

$$\forall x \in \mathcal{H}, \quad x \neq 0, \quad (Ax, x) = \frac{1}{2}((Ax, x) + (x, A^* \cdot x)) = \frac{1}{2} \cdot ((A + A^*)x, x) > 0.$$

Тем самым матрица $\frac{1}{2}(A + A^*) \equiv A_0$ — симметричная и положительно определенная матрица и в таком случае $\delta = \min_i \lambda_i(A_0)$.

- Из неравенства

$$(Ax, x) \geq \delta \|x\|^2$$

следует существование обратной матрицы A^{-1} (отображение, задаваемое матрицей A — взаимнооднозначно): $A > 0 \Rightarrow \exists A^{-1}$.

- Неравенство $A \geq 0$ означает $(Ax, x) \geq 0 \forall x \in \mathcal{H}$ и A^{-1} может и не быть вовсе (у матрицы A невырожденное ядро $\ker A$).
- Случай положительно определенной матрицы A позволяет ввести в \mathcal{H} соответствующую A -энергетическую норму:

$$\|x\|_A = \sqrt{(Ax, x)}$$

и получить достаточное условие сходимости итерационного процесса.

Теорема 3. (Самарского) Пусть $A > 0$ положительно определенная симметричная матрица. Параметр $\tau > 0$ и $B > 0$ таковы, что

$$\left(B - \frac{\tau A}{2}\right) > 0,$$

тогда итерационный процесс (16*) сходится в квадратичной метрике для любого $x_0 \in \mathcal{H}$.

Доказательство.

1) Покажем сходимость итерационной последовательности в энергетической A -норме. Для погрешности итерационного метода имеем итерационное уравнение (17*)

$$z_{n+1} = (E - \tau B^{-1}A)z_n; \quad Az_{n+1} = (A - \tau AB^{-1}A)z_n.$$

Откуда

$$\begin{aligned} \|z_{n+1}\|_A^2 &= (Az_{n+1}, z_{n+1}) = (Az_n - \tau AB^{-1}Az_n, z_n - \tau B^{-1}Az_n) = \\ &= (Az_n, z_n) - \tau(z_n, AB^{-1}Az_n) - \tau(Az_n, B^{-1}Az_n) + \tau^2(B^{-1}Az_n, AB^{-1}Az_n); \end{aligned}$$

т.к. $A^* = A$, то

$$(z_n, AB^{-1}Az_n) = (A^*z_n, B^{-1}Az_n) = (Az_n, B^{-1}Az_n)$$

т.е.

$$\begin{aligned} \|z_{n+1}\|_A^2 &= \|z_n\|_A^2 - 2\tau(BB^{-1}Az_n, B^{-1}Az_n) + \tau^2(AB^{-1}Az_n, B^{-1}Az_n) = \\ &= \|z_n\|_A^2 - 2\tau\left(\left(B - \frac{\tau A}{2}\right)B^{-1}Az_n, B^{-1}Az_n\right) \Rightarrow \|z_{n+1}\|_A^2 \leq \|z_n\|_A^2. \end{aligned}$$

Поскольку

$$2\tau\left(\left(B - \frac{\tau A}{2}\right)B^{-1}Az_n, B^{-1}Az_n\right) \geq 0$$

напомним, что $B - \frac{\tau A}{2} > 0$.

Итак последовательность норм $\|z_n\|_A$ не возрастает и ограничена снизу (нулем) \Rightarrow следовательно существует

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|z_n\|_A < \infty$$

(пока нам достаточно просто существование этого предела).

2) Далее, из условия $(B - \frac{\tau A}{2}) > 0 \Rightarrow \exists \delta > 0$ такое, что:

$$\left(\left(B - \frac{\tau A}{2}\right)B^{-1}Az_n, B^{-1}Az_n\right) \geq \delta \|B^{-1}Az_n\|^2$$

где $\|B^{-1}Az_n\|$ — среднеквадратичная норма. Тогда

$$\|z_{n+1}\|_A^2 - \|z_n\|_A^2 + 2\tau\left(\left(B - \frac{\tau A}{2}\right)B^{-1}Az_n, B^{-1}Az_n\right) = 0.$$

В этом тождестве заменим $2\tau\left(\left(B - \frac{\tau A}{2}\right)B^{-1}Az_n, B^{-1}Az_n\right)$ на меньшее. Получим

$$\|z_{n+1}\|_A^2 - \|z_n\|_A^2 + \delta \|B^{-1}Az_n\|^2 \leq 0.$$

Поскольку последовательность A -норм z_n сходится, то $\|z_{n+1}\|_A^2 - \|z_n\|_A^2 \rightarrow 0$ при $n \rightarrow \infty$. Таким образом

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \|B^{-1}Az_n\| = 0.$$

Нами установлена среднеквадратичная сходимость последовательности $w_n = (B^{-1}Az_n)$, $\|w_n\| \rightarrow 0$.

Но поскольку A — положительно определённая матрица, то $\exists A^{-1}$ и $z_n = A^{-1}Bw_n$, причем

$$\|z_n\| \leq \|A^{-1}B\| \cdot \|w_n\| \Rightarrow \|z_n\| \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty$$

что и требовалось доказать ■

Замечания:

1) Сравнительно несложно показать, что имеет место сходимость итерационной последовательности $\{z_n\}$ в A -энергетической норме

$$\|z_n\|_A \rightarrow 0.$$

Сходимость именно к 0, т.е. эти нормы эквивалентны.

2) В A -норме сходимость первого порядка

$$\|z_{n+1}\|_A \leq q \|z_n\|_A,$$

где

$$q = \sqrt{1 - \frac{2\tau\bar{\lambda}\tilde{\lambda}}{\|B\|^2}}, \quad \bar{\lambda} = \min_k \lambda_k(A), \quad \tilde{\lambda} = \min_k \lambda_k\left(\frac{B+B^*}{2} - \frac{\tau A}{2}\right). \quad (23)$$

4.4 Достаточные условия сходимости простейших итерационных методов

Применим достаточные условия *Теоремы 3* к анализу простейших итерационных методов.

а) метод релаксации:

$$B = E; \quad B - \frac{\tau A}{2} = E - \frac{\tau A}{2} > 0$$

Этому неравенству можно удовлетворить выбором параметра τ . Напомним, из неравенства

$$\|A\| = \sup_{\|x\| \neq 0} \frac{(Ax, x)}{(x, x)} \Rightarrow (Ax, x) \leq \|A\| \cdot (x, x)$$

тем самым $A \leq \|A\| \cdot E$ или $\frac{A}{\|A\|} \leq E$. Получим

$$E - \frac{\tau A}{2} \geq \frac{A}{\|A\|} - \frac{\tau A}{2} = \left(\frac{1}{\|A\|} - \frac{\tau}{2}\right)A > 0$$

таким образом:

$$\frac{1}{\|A\|} - \frac{\tau}{2} > 0 \quad \Rightarrow \quad 0 < \tau < \frac{2}{\|A\|}. \quad (24)$$

б) метод верхней релаксации:

$$B = D + \omega A_L; \quad \tau = \omega.$$

$$B - \frac{\tau A}{2} = D + \omega A_L - \frac{\omega}{2}(A_L + D + A_U) = \left(1 - \frac{\omega}{2}\right)D + \frac{\omega}{2}(A_L - A_U).$$

Положительная определённость матрицы $B - \frac{\tau A}{2}$ означает:

$$\left(B - \frac{\tau A}{2}x, x\right) = \left(1 - \frac{\omega}{2}\right)(Dx, x) + \frac{\omega}{2}((A_Lx, x) - (A_Ux, x)) = \left(1 - \frac{\omega}{2}\right)(Dx, x) > 0.$$

Д силу симметрии матрицы A : $((A_Lx, x) - (A_Ux, x)) \equiv 0$, поскольку $(A_Lx, x) = (x, A_U^*x)$. Итак

$$\left(1 - \frac{\omega}{2}\right)D > 0.$$

Из условия $A > 0$ следует, что матрица $D = \text{diag}(a_{11}, \dots, a_{nn}) > 0$. Действительно, возьмём в качестве вектора \vec{x} базисный вектор \vec{e}_i :

$$\vec{x} = \vec{e}_i = \underbrace{(0, \dots, 1, \dots, 0)^T}_{1 \text{ на } i\text{-ом месте}}; \quad (Ax, x) = a_{ii} = (Dx, x) > 0, \quad \text{т.е. все } a_{ii} > 0.$$

Таким образом для произвольного вектора $\vec{x} \neq 0$

$$(Dx, x) = a_{ii}x_i^2 > 0.$$

Окончательно

$$\left(1 - \frac{\omega}{2}\right) > 0 \quad \Rightarrow \quad 0 < \omega < 2. \quad (25, 26)$$

(В частности при $\omega = 1$ обеспечена сходимость метода Зейделя).

б) метод Якоби: $B = D$ и $\tau = 1$

$$B - \frac{\tau A}{2} = D - \frac{A}{2} > 0, \quad \Rightarrow \quad A < 2D. \quad (27)$$

Сформулируем достаточные условия сходимости метода Якоби

Теорема 4. Если A симметричная положительно определённая матрица с диагональным преобладанием

$$a_{ii} > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad (28)$$

то метод Якоби сходится (в среднеквадратичной метрике).

Действительно, покажем, что в таком случае выполнено неравенство (27):

$$\begin{aligned} (Ax, x) &= \sum_{ij} a_{ij} x_i x_j \leq \sum_{ij} |a_{ij}| |x_i| |x_j| \leq \left| \begin{array}{l} \text{учтём, что} \\ |x_i| |x_j| \leq \frac{|x_i|^2 + |x_j|^2}{2} \end{array} \right| \leq \\ &\leq \frac{1}{2} \left(\sum_{ij} |a_{ij}| |x_i|^2 + \sum_{ij} |a_{ij}| |x_j|^2 \right) = \left| \begin{array}{l} \text{в силу} \\ \text{симметрии} \\ a_{ij} = a_{ji} \end{array} \right| = \\ &= \sum_i |x_i|^2 (a_{ii} + \sum_{j \neq i} |a_{ij}|) < \sum_i |x_i|^2 2a_{ii} = 2(Dx, x). \end{aligned}$$

Таким образом $A < 2D$ что и требовалось доказать ■

II. Алгебраическая проблема собственных значений

§1. Собственные значения (с.з.) и собственные векторы (с.в.) квадратной матрицы. Прямые методы

1.1 Основные понятия

Напомним: Ненулевой вектор $\vec{x} \neq 0$ называется собственным вектором матрицы A , отвечающим собственному значению λ , если

$$Ax = \lambda x, \quad x \neq 0. \quad (1)$$