

Numerické metody

10. přednáška, 25. dubna 2017

Jiří Zelinka

Iterační metody řešení systémů lineárních rovnic

System

$$Ax = b$$

převodeme na

$$x = Tx + g$$

$$x^{k+1} = Tx^k + g, \quad k = 0, 1, \dots$$

Hlavní věta o konvergenci iteračního procesu

Posloupnost $\{x^k\}_{k=0}^{\infty}$ určená iteračním procesem $x = Tx + g$ konverguje pro každou počáteční aproximaci $x^0 \in \mathbb{R}^n$ právě tehdy, když $\rho(T) < 1$, přičemž

$$\lim_{k \rightarrow \infty} x^k = x^*, \quad x^* = Tx^* + g$$

Jacobiova iterační metoda

$$Ax = \mathbf{b}, \quad A = D - L - U,$$

$$Ax = (D - L - U)x = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{x} = D^{-1}(L + U)\mathbf{x} + D^{-1}\mathbf{b}.$$

$$\mathbf{x}^{k+1} = D^{-1}(L + U)\mathbf{x}^k + D^{-1}\mathbf{b}.$$

Z i -té rovnice vypočteme x_i :

$$x_i^{k+1} = - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^k + \frac{b_i}{a_{ii}},$$

Gaussova-Seidelova iterační metoda

$$x_i^{k+1} = - \sum_{j=1}^{i-1} \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^n \frac{a_{ij}}{a_{ii}} x_j^k + \frac{b_i}{a_{ii}}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Maticový zápis:

$$\mathbf{x}^{k+1} = (D - L)^{-1} U \mathbf{x}^k + (D - L)^{-1} \mathbf{b}.$$

Silné řádkové (sloupcové) sumační kritérium:

Nechť matice A je ryze řádkově (sloupcově) diagonálně dominantní, tj.

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n.$$

Pak Jacobiova i Gaussova-Seidelova iterační metoda konverguje pro každou počáteční aproximaci $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$.

Věta

Nechť A je pozitivně definitní matice. Pak Gaussova-Seidelova metoda konverguje pro každou počáteční aproximaci.

Modifikace Gaussovy–Seidelovy metody, ω – relaxační parametr

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

Relaxační metodu lze maticově zapsat takto

$$\mathbf{x}^{k+1} = (D - \omega L)^{-1}[(1 - \omega)D + \omega U]\mathbf{x}^k + \omega(D - \omega L)^{-1}\mathbf{b}$$

$$T_\omega = (D - \omega L)^{-1}[(1 - \omega)D + \omega U]$$

$$f_1(x_1, \dots, x_m) = 0$$

$$\vdots$$

$$f_m(x_1, \dots, x_m) = 0$$

$$F(\mathbf{x}) = \mathbf{o}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m, \quad \mathbf{o} = (0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^m.$$

Systém převedeme na ekvivalentní rovnici

$$\mathbf{x} = G(\mathbf{x}), \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^m$$

$$x_1 = g_1(x_1, \dots, x_m)$$

$$\vdots$$

$$x_m = g_m(x_1, \dots, x_m)$$

$$F(\mathbf{x}) = \mathbf{o}, \quad F \in C^2(O(\xi))$$

$$J_F(\mathbf{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(\mathbf{x})}{\partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m(\mathbf{x})}{\partial x_m} \end{pmatrix}$$

Taylorův rozvoj:

$$F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = F(\mathbf{x}) + J_F(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{h} + O(\|\mathbf{h}\|^2) \cdot (1, \dots, 1)^T$$

$$\mathbf{x} = \mathbf{x}^k, \quad \mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k + \mathbf{h} \Rightarrow \mathbf{h} = \mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k$$

Zanedbáme chybový člen,

$$F(\mathbf{x} + \mathbf{h}) = \mathbf{o} \Rightarrow J_F(\mathbf{x}^k)(\mathbf{x}^{k+1} - \mathbf{x}^k) = -F(\mathbf{x}^k)$$

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^k - J_F^{-1}(\mathbf{x}^k)F(\mathbf{x}^k)$$

Iterační funkce

$$G(\mathbf{x}) = \mathbf{x} - J_F^{-1}(\mathbf{x})F(\mathbf{x})$$

Věta

Nechť ξ je kořenem rovnice $F(\mathbf{x}) = \mathbf{o}$. Necht' $J_F(\mathbf{x})$ je regulární matice se spojitými prvky v okolí $O(\xi)$ bodu ξ , přičemž

$$\|J_F^{-1}(\mathbf{x})\|_{\infty} \leq K, \quad K = \text{konst.},$$

pro všechna \mathbf{x} z tohoto okolí. Necht' funkce $f_i, i = 1, \dots, m$, mají spojitě druhé parciální derivace v $O(\xi)$.

Posloupnost $\{\mathbf{x}^k\}_{k=0}^{\infty}$ určená Newtonovou metodou konverguje ke kořenu ξ za předpokladu, že počáteční aproximace \mathbf{x}^0 leží dostatečně blízko ξ . Řád metody je roven dvěma.

Základní pojmy

$$Ax = \mathbf{b}, A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}, \mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}.$$

A – matice soustavy, regulární. Řešení: $\tilde{\mathbf{x}} = A^{-1} \mathbf{b}$

Rozšířená matice soustavy:

$$(A | \mathbf{b}) = \left(\begin{array}{ccc|c} a_{11} & \cdots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{nn} & b_n \end{array} \right)$$

A – dolní trojúhelníková: $a_{ij} = 0$ pro $i < j$.

A – horní trojúhelníková: $a_{ij} = 0$ pro $i > j$.

A – pásová, jestliže existují $p, q, 1 < p, q < n$ taková, že $a_{ij} = 0$, jestliže $i + p \leq j$ nebo $j + q \leq i$, šířka pásu $w = p + q - 1$.

A – třídiagonální pro $p = q = 2$.

A – ryze řádkově diagonálně dominantní

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, \dots, n.$$

A – ryze sloupcově diagonálně dominantní – podobně

Věta:

Ryze řádkově (sloupcově) diagonálně dominantní matice, je regulární.

Gaussova eliminační metoda

Úprava soustavy na soustavu s horní trojúhelníkovou maticí R :

$$(A | \mathbf{b}) \longrightarrow (R | \tilde{\mathbf{b}})$$

Pak provádíme tzv. zpětný chod – počítáme řešení od poslední složky k první.

Elementární úpravy a matice úprav

Nemění řešení, každá úprava má inverzi.

1. násobení řádku nenulovou konstantou c

$$I_c = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & c & & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}, \quad I_c^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & \vdots \\ \vdots & & & 1/c & & \vdots \\ \vdots & & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

2. výměna řádků i, k

$$P_{i,k} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & & \dots & & & & & & 0 \\ 0 & 1 & & & & & & & & & 0 \\ & & \ddots & & & & & & & & \\ & & & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & & & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ & & & 0 & 0 & 1 & & & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \ddots & & \vdots & \vdots & & & \vdots \\ & & 0 & 0 & & & & 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & & 0 & 1 & 0 & \dots & & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ & & 0 & 0 & 0 & \dots & & 0 & 0 & 1 & & \\ & & \vdots & & & & & & & & \ddots & \\ 0 & & 0 & & & & & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad P_{i,k}^{-1} = P_{i,k}$$

$P_{i,k}$ – permutační matice

3. přičtení c násobku i -tého řádku ke k -tému, $i < k$

$$G_{i,k,c} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \dots & & & 0 \\ 0 & 1 & & \dots & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & & \\ i & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ k & & & c & & 1 & \\ & & & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

$$G_{i,k,c}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & & & 0 \\ 0 & 1 & \dots & & & 0 \\ \vdots & & \ddots & & & \\ i & & & 1 & & \\ k & & & -c & \dots & 1 \\ & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Ve skutečnosti pro převod na trojúhelníkovou matici stačí 2. a 3. elementární úprava.

Postup při Gaussově eliminaci

(1) výměna 1. a k -tého řádku (v případě potřeby)

$$(A | \mathbf{b}) \longrightarrow (A^{(1)} | \mathbf{b}^{(1)}), \quad (A^{(1)} | \mathbf{b}^{(1)}) = P_{1,k} \cdot (A | \mathbf{b})$$

(1') vynulování prvního sloupce pod hlavní diagonálou

$$(A^{(1')} | \mathbf{b}^{(1')}) = G_1 \cdot (A^{(1)} | \mathbf{b}^{(1)}), \quad G_1 = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & 0 & \cdots & 1 \end{pmatrix},$$

$$l_{k1} = -\frac{a_{k1}^{(1)}}{a_{11}^{(1)}}$$

(i) výměna i -tého. a k -tého řádku (v případě potřeby)

$$\left(A^{(i)} \mid \mathbf{b}^{(i)} \right) = P_{i,k} \cdot \left(A^{(i-1')} \mid \mathbf{b}^{(i-1')} \right)$$

(i') vynulování i -tého sloupce pod hlavní diagonálou

$$\left(A^{(i')} \mid \mathbf{b}^{(i')} \right) = G_i \cdot \left(A^{(i)} \mid \mathbf{b}^{(i)} \right),$$

$$G_i = \begin{pmatrix} 1 & & \cdots & & 0 \\ & \ddots & & & \\ \vdots & & 1 & & \\ & & l_{i+1,i} & \ddots & \\ & & \vdots & & \ddots \\ 0 & & l_{n,i} & & 1 \end{pmatrix}, \quad l_{ki} = -\frac{a_{ki}^{(i)}}{a_{ii}^{(i)}}$$

$$i = 2, \dots, n-1$$

Gaussova eliminace bez výměny řádků:

$$(R \mid \tilde{\mathbf{b}}) = G_{n-1} \cdot \dots \cdot G_2 \cdot G_1 \cdot (A \mid \mathbf{b})$$

tedy

$$R = G_{n-1} \cdot \dots \cdot G_2 \cdot G_1 \cdot A$$

odkud

$$G_1^{-1} G_2^{-1} \dots G_{n-1}^{-1} R = A.$$

Matice G_i jsou dolní trojúhelníková, tedy G_1^{-i} jsou také dolní trojúhelníkové, takže

$$A = L \cdot R, \quad L = G_1^{-1} G_2^{-1} \dots G_{n-1}^{-1}.$$

L – dolní trojúhelníková matice.

$$G_i^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & \cdots & & 0 \\ & \ddots & & & \\ \vdots & & 1 & & \\ & & -l_{i+1,i} & \ddots & \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \\ 0 & & -l_{ni} & & 1 \end{pmatrix},$$

pak

$$L = G_1^{-1} G_2^{-1} \cdots G_{n-1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & \cdots & 0 \\ -l_{21} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ -l_{n1} & \cdots & -l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}.$$

LR rozklad

$A = L \cdot R$: LR (též LU) rozklad matice A

Použití při řešení soustavy: substituce $R\mathbf{x} = \mathbf{y}$, řešíme soustavu $L\mathbf{y} = \mathbf{b}$ s dolní trojúhelníkovou maticí, pak $R\mathbf{x} = \mathbf{y}$ s horní trojúhelníkovou maticí.

LR rozklad s výměnou řádků

Provádíme LR rozklad matice $P \cdot A$, kde P je vhodná permutační matice, která provádí výměnu řádků.

Při praktickém výpočtu, pokud narazíme na potřebu vyměnit řádky, postupujeme takto:

Pokud bychom vyměnili řádky předem, v už vypočítané části matice L by tyto řádky byly vyměněny, zbytek by se nezměnil.

Proto můžeme vyměnit řádky ve vypočítané části matice L .

Dále v pomocném vektoru \mathbf{p} na začátku nastaveném na $(1, 2, \dots, n)^T$ zaznamenáme výměnu řádků, tedy vyměníme v něm stejné řádky.

Příklad

$$2x_1 + 4x_2 - x_3 = -5$$

$$x_1 + x_2 - 3x_3 = -9$$

$$4x_1 + x_2 + 2x_3 = 9$$

Výběr vedoucího prvku (pivota) – částečný

Při úpravě i -tého sloupce najdeme mezi prvky $a_{ii}^{(i-1)}, \dots, a_{ni}^{(i-1)}$ prvek s maximální absolutní hodnotou (např. $a_{ki}^{(i-1)}$), pak vyměníme i -tý a k -tý řádek.

Výběr vedoucího prvku (pivota) – úplný

Hledáme prvek s maximální absolutní hodnotou mezi $a_{jk}^{(i-1)}$, $i \leq j \leq n$, $i \leq k \leq n$, pak vyměníme příslušný řádek a spoupec, čímž se změní pořadí proměnných.

Příklad:

LR rozklad matice

$$A = \begin{pmatrix} 0,0001 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

se zaokrouhlováním na 3 platné číslice.

Věta

Nechť všechny hlavní minory matice $A \in \mathcal{M}_n$ jsou různé od nuly, tj.

$$a_{11} \neq 0, \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} \neq 0, \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} \neq 0, \dots \det A \neq 0.$$

Pak matici A lze rozložit na součin dolní a horní trojúhelníkové matice.

Důsledky

- Nechť matice A je pozitivně definitní. Pak GEM lze provést bez výměny řádků a sloupců.
- Nechť matice A je ryze řádkově diagonálně dominantní. Pak GEM lze provést bez výměny řádků a sloupců.