Cvičení z Numerických metod I - 11. a 12. týden

Iterační metody pro systém nelineárních rovnic

Řešíme systém m nelineárních rovnic o m neznámých:

$$\begin{aligned} f_1(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0 \\ &\vdots \\ f_m(x_1, x_2, \dots, x_m) &= 0, \end{aligned}$$

vektorový zápis soustavy: $F(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$, $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^m$, $\mathbf{0} = (0, \dots, 0)' \in \mathbb{R}^m$,
řešení: $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_m)' \in \mathbb{R}^m$.

Newtonova metoda

Zabýváme se řešením úlohy $F(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$, uvažujeme ekvivalentní úlohu ve tvaru $\boldsymbol{x} = G(\boldsymbol{x})$ s iterační maticí

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

kde $J_F(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dots & \frac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_m} \end{pmatrix}$ se nazývá Jacobiova matice funkce F.

Newtonova iterační metoda pro systém $F(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$ za předpokladu, že $J_F(\boldsymbol{x})$ je regulární, se spojitými prvky v okolí bodu $\boldsymbol{\xi}$:

$$\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k - J_F^{-1}(\boldsymbol{x}^k)F(\boldsymbol{x}^k),\ k = 0, 1, 2, \dots.$$

Postup pro výpočet:

1. označme $\boldsymbol{\Delta}^k = \boldsymbol{x}^{k+1} - \boldsymbol{x}^k$
2. $J_F(\boldsymbol{x}^k)\boldsymbol{\Delta}^k = -F(\boldsymbol{x}^k) \longrightarrow$ výpočet $\boldsymbol{\Delta}^k$
3. dosazení do iteračního vztahu: $\boldsymbol{x}^{k+1} = \boldsymbol{x}^k + \boldsymbol{\Delta}^k$

Příklad. Vypočítejte první dva kroky Newtonovy metody pro za daný systém rovnic

$$\begin{aligned} f_1 :&\quad x^2 - x + y - \frac{1}{2} = 0 \\ f_2 :&\quad x^2 - 5xy - y = 0 \end{aligned}$$

a počáteční aproximaci $\boldsymbol{x}^0 = \begin{pmatrix} x^0 \\ y^0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

Řešení. Výpočet parciálních derivací a sestavení Jacobiho matice:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1(x,y)}{\partial x} &= 2x - 1, \quad & \frac{\partial f_1(x,y)}{\partial y} &= 1, \\ \frac{\partial f_2(x,y)}{\partial x} &= 2x - 5y, \quad & \frac{\partial f_2(x,y)}{\partial y} &= -5x - 1, \end{aligned}$$

$\longrightarrow$ Jacobiho matice: $J_F(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 2x-1 & 1 \\ 2x-5y & -5x-1 \end{pmatrix}$.

Označme $\boldsymbol{\Delta} = \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix}$ a počítejme soustavu $J_F(\boldsymbol{x}^0)\boldsymbol{\Delta}^0 = -F(\boldsymbol{x}^0)$, kde

$$J_F(\boldsymbol{x}^0) = \begin{pmatrix} 2x^0-1 & 1 \\ 2x^0-5y^0 & -5x^0-1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -6 \end{pmatrix} \text{ a } -F(\boldsymbol{x}^0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Dostáváme soustavu

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -6 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ -1 \end{pmatrix},$$

kterou vyřešíme (Gaussova eliminační metoda):

$$\left(\begin{array}{cc|c} 1 & 1 & \frac{1}{2} \\ 2 & -6 & -1 \end{array} \right) \sim \left(\begin{array}{cc|c} 1 & 0 & \frac{1}{4} \\ 0 & 1 & \frac{1}{4} \end{array} \right) \Rightarrow \boldsymbol{\Delta}^0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

1. krok:

$$\boldsymbol{x}^1 = \boldsymbol{x}^0 + \boldsymbol{\Delta}^0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{5}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix}.$$

Výpočet $\boldsymbol{\Delta}^1$: řešíme soustavu $J_F(\boldsymbol{x}^1)\boldsymbol{\Delta}^1 = -F(\boldsymbol{x}^1)$

$$\begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 1 \\ \frac{5}{4} & -\frac{29}{4} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \Delta x \\ \Delta y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{16} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{\Delta}^1 = \begin{pmatrix} -\frac{13}{776} \\ -\frac{29}{776} \end{pmatrix},$$

2. krok:

$$\boldsymbol{x}^2 = \boldsymbol{x}^1 + \boldsymbol{\Delta}^1 = \begin{pmatrix} \frac{5}{4} \\ \frac{1}{4} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -\frac{13}{776} \\ -\frac{29}{776} \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1.2332 \\ 0.2126 \end{pmatrix}.$$

Přímé metody řešení systému lineárních rovnic

Máme systém lineárních rovnic

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

Budeme hledat přesné řešení soustavy $\mathbf{x}^* = \begin{pmatrix} x_1^* \\ \vdots \\ x_n^* \end{pmatrix}$.

Nejznámější metodou je Gaussova eliminační metoda (GEM). Hlavní myšlenkou je převést zadaný systém ekvivalentními úpravami na redukovaný problém, tj. na systém s horní trojúhelníkovou maticí $\mathbf{Rx} = \mathbf{c}$. Z toho systému pomocí zpětného chodu jednoduše získáme přesné řešení $\mathbf{x}^*$. Zároveň pomocí GEM můžeme získat rozklad matice $\mathbf{A}$ na součin dolní a horní trojúhelníkové matice.

GEM: $(\mathbf{A}|\mathbf{b}) \sim \cdots \sim (\mathbf{R}|\mathbf{c})$
Ukážeme si několik modifikací GEM:

1. **GEM bez výměny řádků**
   - neměníme pořadí řádků (ne vždy je to možné - některý pivot může být nulový a nelze pokračovat)
   - násobky prvního řádku odečítáme od ostatních řádků, abychom pod prvním prvkem prvního řádku (hlavní prvek, pivot) získali nuly
   - pokud máme nuly pod pivotem prvního řádku, uděláme totéž pod prvkem na diagonále druhého řádku (pivot druhého řádku)
   - postup dále opakujeme podle velikosti matice
   - na konci získáme $(\mathbf{R}|\mathbf{c})$, kde $\mathbf{R}$ je horní trojúhelníková matice
   - zároveň získáme rozklad matice $\mathbf{A} = \mathbf{LR}$, kde $\mathbf{L}$ je dolní trojúhelníková matice obsahující multiplikátory, kterými jsme násobili jednotlivé řádky

2. **GEM s částečným výběrem pivota**
   - v prvním sloupci najdeme největší prvek v absolutní hodnotě
   - řádek s tímto prvkem vyměníme s prvním řádkem a prvky pod tímto pivotem vynulujeme
   - v druhém sloupci (bez prvního řádku) najdeme největší prvek v absolutní hodnotě
   - řádek s tímto prvkem vyměníme s druhým řádkem a prvky pod tímto pivotem vynulujeme
   - postup dále opakujeme podle velikosti matice
   - na konci získáme $(\mathbf{R}|\mathbf{c})$, kde $\mathbf{R}$ je horní trojúhelníková matice
   - zároveň získáme rozklad matice $\mathbf{PA} = \mathbf{LR}$, kde $\mathbf{L}$ je dolní trojúhelníková matice obsahující multiplikátory, kterými jsme násobili jednotlivé řádky, a matice $\mathbf{P}$ je permutační matice (ukazuje, které řádky jsme museli vyměnit)

Příklad Řešte systém lineárních rovnic

$$\begin{array}{rcrcrcr} 2x_1 & + & 6x_2 & - & x_3 & = & 3 \\ 2x_1 & + & 3x_2 & + & x_3 & = & 4 \\ -3x_1 & - & 6x_2 & & & = & -3 \end{array}$$

1. **GEM bez výměny řádků**

   Pro náš systém je rozšířená matice soustavy:

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 2 & 6 & -1 & 3 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \\ -3 & -6 & 0 & -3 \end{array}\right)$$

   První řádek vynásobíme 1 a odečteme od druhého. První řádek vynásobíme $-\frac{3}{2}$ a odečteme od třetího. Prvky dolní trojúhelníkové matice $\mathbf{L}$ tedy budou $l_{21} = 1$ a $l_{31} = -\frac{3}{2}$. Získáme

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 2 & 6 & -1 & 3 \\ 0 & -3 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & -\frac{3}{2} & \frac{3}{2} \end{array}\right)$$

   Druhý řádek vynásobíme -1 a odečteme od druhého. Prvek dolní trojúhelníkové matice $\mathbf{L}$ tedy bude $l_{32} = -1$. Získáme

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 2 & 6 & -1 & 3 \\ 0 & -3 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{5}{2} \end{array}\right)$$

   Řešení systému rovnic tedy je

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{5/2}{1/2} = 5 \\ x_2 &= \frac{1 - 2 \cdot 5}{-3} = 3 \\ x_1 &= \frac{3 + 5 - 6 \cdot 3}{2} = -5 \end{aligned}$$

   Rozklad matice $\mathbf{A}$ je

$$\mathbf{A} = \mathbf{LR} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -\frac{3}{2} & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 0 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

2. **GEM s částečným výběrem pivota**

   Začneme se stejnou rozšířenou maticí soustavy:

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 2 & 6 & -1 & 3 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \\ -3 & -6 & 0 & -3 \end{array}\right)$$

   Z prvního sloupce vybereme největší číslo v absolutní hodnotě. To je -3 ve třetím řádku. Vyměníme tedy třetí řádek s prvním. To odpovídá permutační matici $\mathbf{P_1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$.

   Získáme

$$\left(\begin{array}{rrr|r} -3 & -6 & 0 & -3 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \\ 2 & 6 & -1 & 3 \end{array}\right)$$

První řádek vynásobíme $-\frac{2}{3}$ a odečteme od druhého, resp. od třetího. Prvky dolní trojúhelníkové matice $\mathbf{L}$ tedy budou $l_{21} = -\frac{2}{3}$ a $l_{31} = -\frac{2}{3}$. Získáme

$$\left(\begin{array}{rrr|r} -3 & -6 & 0 & -3 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \end{array}\right)$$

V druhém sloupci vybereme největší prvek v absolutní hodnotě (bez prvního řádku). To je 2 ve třetím řádku. Vyměníme tedy třetí a druhý řádek. To odpovídá permutační matici $\mathbf{P_2} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$. Pozor, musíme vyměnit i již získané prvky matice $\mathbf{L}$. Získáme

$$\left(\begin{array}{rrr|r} -3 & -6 & 0 & -3 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & -1 & 1 & 2 \end{array}\right)$$

Druhý řádek vynásobíme $-\frac{1}{2}$ a odečteme od druhého. Prvek dolní trojúhelníkové matice $\mathbf{L}$ tedy bude $l_{32} = -\frac{1}{2}$. Získáme

$$\left(\begin{array}{rrr|r} -3 & -6 & 0 & -3 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} & \frac{5}{2} \end{array}\right)$$

Řešení systému rovnic tedy je

$$\begin{aligned} x_3 &= \frac{5/2}{1/2} = 5 \\ x_2 &= \frac{1+5}{2} = 3 \\ x_1 &= \frac{-3+6\cdot 3}{-3} = -5 \end{aligned}$$

Celková permutační matice je

$$\mathbf{P} = \mathbf{P_2}\mathbf{P_1} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

a rozklad matice $\mathbf{PA}$ tedy je

$$\mathbf{PA} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\frac{2}{3} & 1 & 0 \\ -\frac{2}{3} & -\frac{1}{2} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -3 & -6 & 0 \\ 0 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Další modifikací GEM by mohla být **GEM s úplným výběrem pivota**. Ukážeme si ji rovnou při řešení systému lineárních rovnic z předchozího příkladu.

Začneme opět s rozšířenou maticí soustavy:

$$\left(\begin{array}{rrr|r} 2 & 6 & -1 & 3 \\ 2 & 3 & 1 & 4 \\ -3 & -6 & 0 & -3 \end{array}\right)$$

Vybereme největší číslo v absolutní hodnotě v celé matici $\mathbf{A}$. To je 6 v prvním řádku a druhém sloupci nebo -6 ve třetím řádku a druhém sloupci. Můžeme si tedy vybrat a řádek s tímto prvkem přesuneme na první řádek. My vybereme prvek v prvním řádku a druhém sloupci, nemusíme tedy žádné řádky měnit. Vynulujeme všechny prvky ve druhém sloupci pod tímto prvkem. První řádek vynásobíme $\frac{1}{2}$ a odečteme od druhého, podobně první řádek vynásobíme -1 a odečteme od třetího. Získáme

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 6 & -1 & 3 \\ 1 & 0 & \frac{3}{2} & \frac{5}{2} \\ -1 & 0 & -1 & 0 \end{array}\right)$$

V submatici bez prvního řádku a druhého sloupce vybereme největší prvek v absolutní hodnotě. To jsou $\frac{3}{2}$ v druhém řádku a třetím sloupci. Řádek s tímto prvkem bychom přesunuli na druhý řádek, to už opět máme. Prvky pod tímto prvkem vynulujeme. Druhý řádek vynásobíme $-\frac{2}{3}$ a odečteme od třetího. Získáme

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & 6 & -1 & 3 \\ 1 & 0 & \frac{3}{2} & \frac{5}{2} \\ -\frac{1}{3} & 0 & 0 & \frac{5}{3} \end{array}\right)$$

Z této rozšířené matice jednoduše získáme řešení soustavy

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{5/3}{-1/3} = -5 \\ x_3 &= \frac{5/2+5}{2/3} = 5 \\ x_2 &= \frac{3+5+2\cdot 5}{6} = 3 \end{aligned}$$

Na závěr se podíváme na obecný rozklad matice $\mathbf{A}$ na součin dolní a horní trojúhelníkové matice - **obecný LU rozklad**. Zároveň si ukážeme, jak tento rozklad využít při řešení soustav lineárních rovnic.

Obecný LU rozklad ukážeme opět na předchozím příkladu soustavy lineárních rovnic. Máme

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 2 & 3 & 1 \\ -3 & -6 & 0 \end{pmatrix} \text{ a } \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Rozklad matice $\mathbf{A}$ si zapíšeme obecně.

$$\begin{aligned} \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 2 & 3 & 1 \\ -3 & -6 & 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & 0 \\ l_{21} & l_{22} & 0 \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} l_{11}u_{11} & l_{11}u_{12} & l_{11}u_{13} \\ l_{21}u_{11} & l_{21}u_{12}+l_{22}u_{22} & l_{21}u_{13}+l_{22}u_{23} \\ l_{31}u_{11} & l_{31}u_{12}+l_{32}u_{22} & l_{31}u_{13}+l_{32}u_{23}+l_{33}u_{33} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Porovnáním jednotlivých prvků matic získáme 9 rovnic pro 12 neznámých, řešení tedy není jednoznačné. Můžeme například předpokládat, že na diagonále dolní trojúhelníkové matice $\mathbf{L}$ jsou 1, tedy $l_{11} = l_{22} = l_{33} = 1$. Pak dostaneme

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -\frac{3}{2} & -1 & 1 \end{pmatrix} \text{ a } \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 0 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Nyní přistoupíme k řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$. Tu můžeme přepsat jako $\mathbf{LUx} = \mathbf{b}$. Řešení soustavy najdeme postupným vyřešením dvou soustav lineárních rovnic s trojúhelníkovými maticemi:

$$\begin{aligned} \mathbf{Lz} &= \mathbf{b} \\ \mathbf{Ux} &= \mathbf{z} \end{aligned}$$

Tedy

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -\frac{3}{2} & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ -3 \end{pmatrix}$$

Řešení této soustavy je $\mathbf{z} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ \frac{5}{2} \end{pmatrix}$. Poté řešíme další soustavu

$$\begin{pmatrix} 2 & 6 & -1 \\ 0 & -3 & 2 \\ 0 & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 1 \\ \frac{5}{2} \end{pmatrix}$$

Vyřešením získáme konečné řešení soustavy $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} -5 \\ 3 \\ 5 \end{pmatrix}$.