Část I

Lineární algebra

Organizační úvod

Poznámka (Organizační úvod)
Přednáška rozdělena na 2 části. Materiály na stránkách / studentském úložišti.

Úvod

Poznámka (O čem vlastně Numerická matematika je)
Nejprve musíme problém diskretizovat (většinou bývá nekonečně dimenzionální/spojitý a my chceme konečnou dimenzi a diskrétní problém). Inverze k diskretizaci je relevance.

1 Chování algoritmů v počítačové aritmetice

Definice 1.1 (Double precision)

Obsahuje 64 bitů – znaménko (1b) + exponent (11b) + mantisa (52b). Reprezentuje číslo v normalizovaném tvaru $(\pm 1, \text{mantisa} \cdot 2^{e=\text{exponent}})$, je-li $-1022 = e_{min} \leq e \leq e_{max} = 1023$.

Speciální hodnoty jsou $e = e_m in - 1$, kde pokud je mantisa 0, tak reprezentujeme 0, jinak máme $\pm 0, \text{mantisa} \cdot 2^e$. Pro $e = e_{max} + 1$ je při mantise nula hodnota $\pm\infty$, jinak tzv. NaN (not-a-number).

Toto „těleso“ označujeme $\mathbb{F}$.

Poznámka
V intervalu mezi dvěma exponenty jsou čísla rozloženy rovnoměrně.

Poznámka
Samozřejmě existují i jiné přesnosti, standardně binary32. binary128 je málo podporované, binary16 je spíše pro grafické karty.

Definice 1.2 (Operace s $\mathbb{F}$)

První, co potřebujeme je schopnost zaokrouhlit. V standardu je zaokrouhlení na nejbližší číslo (tj. $round(x) = x(1 + \delta)$, kde $|\delta| \leq u$ je minimální a záleží na reprezentaci).

Standardní model aritmetiky s konečnou přesností předpokládá, že výsledek každé operace je rozmazán nějakým $(1+\delta)$, kde $|\delta| \le u$.

Definice 1.3 (Škálování, kancelace (vyrušení, ztráta informace))

Může se nám stát, že přičítáme tak malá čísla, že se výsledek neliší od původní hodnoty. Tomu se předchází škálováním dat.

Také se může stát, že odčítáme dvě téměř stejná čísla ($|a-b| \ll |a|+|b|$), tak se odečtou úplně, protože drobná změna se ztratila v jejich reprezentaci. Takové výrazy je třeba vyjádřit jinak, aby se předešlo odčítání blízkých čísel.

1.1 Analýza chyb

Poznámka
Na chyby při výpočtech se můžeme dívat 2 způsoby: jako na chybu výsledku, nebo jako na chybu zadání.

Lemma 1.1

Nechť $|\alpha_i| \le u$, $i \in [n]$ *a nechť* $n \cdot u < 0.01$. *Potom platí*

$$\prod_{i=1}^{n}(1+\alpha_i) = 1+\beta_n,$$

kde $|\beta_n| \le 1.01 \cdot n \cdot u$.

Důkaz
Vyjádříme si β_n, omezíme $|\beta_n| \le (1+u)^n - 1$. Jelikož $1+x \le e^x$ pro $x \ge 0$, pak tuto hodnotu dále omezíme $e^{n\cdot u} - 1 < n \cdot u(1 + \frac{n\cdot u}{2} + \left(\frac{n\cdot u}{2}\right)^2 + \dots) = \frac{n\cdot u}{1-n\cdot u/2} < 1.01 \cdot n \cdot u$. $\square$

Definice 1.4 (Přímá analýza chyb)

Popis šíření zaokrouhlovacích chyb v algoritmu, odhad přímé chyby je

$$||a(x) - fl(a(x))||,$$

kde fl je strojové zaokrouhlování. Nezávislý (tzv. efektivní) odhad možný zřídka.

Definice 1.5 (Zpětná analýza chyb)

Snaha interpretovat zaokrouhlovací chyby pomocí změn vstupních dat, tj. odhad zpětné chyby, která je

$$||x - \hat{x}||,$$

kde $\hat{x}$ je vstupní dato, se kterým by se dospělo stejného výsledku, ale přesnou cestou.

1.2 Stabilita algoritmu

Definice 1.6 ($O(u)$)

$O(u)$ je neurčité číslo,

$$|O(u)| \leq K \cdot u,$$

kde K nezávisí na datech (jedině na dimenzi, na které může závisel libovolně).

Definice 1.7 (Zpětně stabilní algoritmus)

Algoritmus $a(x)$ je zpětně stabilní, pokud

$$\forall x\ \exists \hat{x} : fl(a(x)) = a(\hat{x}) \wedge \frac{||x - \hat{x}||}{||x||} = O(u).$$

(Tj. jestliže se chyby výpočtu způsobené zaokrouhlováním promítnou do dostatečně malých změn vstupních dat.)

Definice 1.8 (Numerická stabilita algoritmu)

Algoritmus $a(x)$ je numericky stabilní, pokud

$$\forall x\ \exists \hat{x} : \frac{||x - \hat{x}||}{||x||} = O(u) \wedge \frac{||a(\hat{x} - fl(a(x)))}{a(\hat{x})} = O(u).$$

1.3 Podmíněnost problému

Poznámka

Mějme matematický problém $f : X \to Y$, kde X, Y jsou normované lineární prostory, f je spojité zobrazení, mající vlastnosti, že zkoumáme existenci, jednoznačnost řešení a že problém je citlivý na změny dat. Co to ale je?

Definice 1.9 (Číslo podmíněnosti)

Označme Δx malou změnu dat (perturbace), $\Delta f(x) = f(x + \Delta x) - f(x)$ změnu řešení.

Číslo podmíněnosti problému f v x ke

$$\varkappa_f(x) \equiv \lim_{\delta \to 0} \sup_{||\Delta x|| \leq \delta} \left(\frac{||\Delta f(x)||}{||f(x)||} / \frac{||\Delta x||}{||x||} \right).$$

Špatně či dobře podmíněný problém je, že malé změny x vedou na velké či malé změny v $f(x)$.

Definice 1.10 (Generovaná maticová norma)

Mějme vektorovou normu $||\cdot||$ na $\mathbb{C}^n$ a $\mathbb{C}^m$. Generovanou maticovou normou nazveme funkcionál $g : \mathbb{C}^{n\times m} \to \mathbb{R}$,

$$g(A) \equiv \max_{x\neq \mathbf{o}} \frac{||Ax||}{||x||} = \max_{||x||=1} ||Ax||.$$

$g(A)$ je norma, značíme ji $||A||$. Je navíc „skoro multiplikativní“: $||AB|| \leq ||A|| \cdot ||B||$. A z definice $||Ax|| \leq ||A|| \cdot ||x||$. Je-li A čtvercová, pak $||I|| = 1$.

Definice 1.11 (Frobeniova norma)

$||A||_F = \sqrt{\sum_{i,j} a_{ij}^2}$.

Poznámka (Podmíněnost Ax)
Pokud je problém $f : x \mapsto Ax$, $\varkappa_f(x) = \frac{||x||}{||Ax||}||A||$.

Pokud A je regulární, pak z $||x|| = ||A^{-1}Ax|| \leq ||A^{-1}|| \cdot ||Ax||$ plyne $\varkappa_f(x) \leq ||A|| \cdot ||A^{-1}||$.

Definice 1.12

Číslo z předchozí poznámky nazveme číslo podmíněnosti matice A a značíme ho $\varkappa(A) \equiv ||A|| \cdot ||A^{-1}||$.

Poznámka
Zřejmě $1 = ||A^{-1}A|| \leq \varkappa(A)$.

Definice 1.13 (Přesnost výpočtu)

Nechť $a(x)$ je algoritmus. Pak (relativní) přesnost výpočtu je

$$\frac{||a(x) - fl(a(x))||}{||a(x)||}.$$

Poznámka
Je-li algoritmus a řešící problém f v $\mathbb{F}$ zpětně stabilní, potom $fl(a(x)) = a(\hat{x})$ pro nějaké $\hat{x}$ splňující

$$\frac{||x - \hat{x}||}{||x||} = O(u) \equiv \delta.$$

Algoritmus řeší daný problém znamená $f(x) = a(x)$, proto

$$\frac{||a(x) - a(\hat{x})||}{||a(x)||} = \frac{||f(x) - f(\hat{x})||}{||f(x)||}.$$

Potom

$$\frac{\frac{||f(x)-f(\hat{x})||}{||f(x)||}}{\frac{||x-\hat{x}||}{||x||}} \leq \sup_{\frac{||x-\tilde{x}||}{||x||}\leq\delta} \frac{\frac{||f(x)-f(\tilde{x})||}{||f(x)||}}{\frac{||x-\tilde{x}||}{||x||}} \approx \varkappa_f(x)$$

pro „rozumně“ spojitý problém f. Tj.

$$\frac{||a(x) - fl(a(x))||}{||a(x)||} \lesssim \varkappa_f(x)O(u).$$

Tedy přesnost zpětně stabilního algoritmu je (může být) ovlivněna podmíněností problému a strojovou přesností.

2 Schurův rozklad

Definice 2.1

V dalším bude $||x||$ euklidovská norma, stejně tak $||A||$ bude tzv. spektrální norma, která je odvozena právě od Eukleidovské. $\varkappa(S) = ||S|| \cdot ||S^{-1}||$ je číslo podmíněnosti S.

Poznámka

Jestliže jsou vstupní data (matice A) zatížena chybou E, tak transformace prováděné na A budeme provádět i na E.

Poznámka

Matice, které nám nezvětší chybu (tedy ty, co bychom chtěli používat) jsou unitární matice. Platí totiž

$$||x|| = \sqrt{x^*x} = \sqrt{x^*U^*Ux} = ||Ux||.$$

$$\varkappa(U) = 1, \varkappa(U^*EU) = \varkappa(E).$$

Tomuto se říká unitární invariantnost spektrální normy. Unitární invariantnost Frobeniovy normy se dokáže také jednoduše $||A||_F^2 = \text{trace}(A^*A) = \text{trace}(A^*U^*UA)$.

Naopak platí i opačná implikace ($\varkappa = 1 \implies$ unitarita), ale tu dokážeme později.

Věta 2.1 (Schurova)

Pro libovolnou čtvercovou matici A existuje unitární matice U tak, že

$$R = U^*AU,$$

kde R je horní trojúhelníková matice s vlastními čísly matice A na diagonále v libovolném předepsaném pořadí.

Důkaz
Indukcí podle řádu matice A. Pro řád $n = 1$ věta platí. Předpokládejme, že věta platí pro n: Nechť je dáno $A \in \mathbb{C}^{(n+1)\times(n+1)}$ a uspořádání vlastních čísel. Označme λ první vlastní číslo v tomto uspořádání, x je příslušný vektor. Doplníme x na čtvercovou unitární $H = (x|X)$,

$$H^*AH = \begin{pmatrix} x^*Ax & x^*AX \\ X^*Ax & X^*AX \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda & b^* \\ 0 & C \end{pmatrix}.$$

Na matici C aplikujeme předpoklad indukčního kroku. Součinem H a získané matice (rozšířené o id na první souřadnici). □

Poznámka
Hledání Schurova rozkladu lze převést na hledání kořenů polynomu (a zpět), tedy (z neřešitelnosti hledání kořenů polynomu řádu většího než 5) Schurův rozklad nelze spočítat obecně přesně v konečném množství korků.

Definice 2.2 (Kvazi-trojúhelníková matice)

Čtvercová matice T je horní kvazi-trojúhelníková, pokud je blokově horní trojúhelníková a na diagonále má bloky 1×1 nebo 2×2.

Věta 2.2

Nechť A je reálná čtvercová matice. Potom existují ortogonální U a reálná kvazi-trojúhelníková T takové, že

$$T = U^TAU,$$

Navíc vlastní čísla každého 2×2 diagonálního bloku matice T tvoří komplexně sdružený pár.

Důkaz
Bez důkazu □

Důsledek
$A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je normální $\Leftrightarrow \exists$ unitární U a diagonální D tak, že

$$U^*AU = D, \qquad A = UDU^*.$$

Důsledek (Důsledku)

$$Au_j = \lambda_j u_j.$$

Důsledek (Dyadický rozvoj)

$$A = UDU^* = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i u_i u_i^*.$$

Poznámka
$||\lambda_i u_i u_i^*|| = |\lambda_i|$.

Věta 2.3 (O hustotě diagonalizovatelných matic)

$\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ a pro libovolně malé $\varepsilon > 0$ $\exists$ diagonalizovatelná $A_\varepsilon \in \mathbb{C}^{n\times n}$ s navzájem různými vlastními čísly tak, že $||A - A_\varepsilon|| < \varepsilon$.

Důkaz
Schurova věta nám dává rozklad $A = URU^*$. Není-li A diagonalizovatelná, pak musí mít alespoň jedno násobné vlastní číslo. Zvolme si

$$R_\varepsilon = R + D\varepsilon,$$

aby na diagonále R_ε byly různé hodnoty a $||D_\varepsilon|| < \varepsilon$. Uvažujme $A_\varepsilon := UR_\varepsilon U^*$. A_ε má různá vlastní čísla, tedy je diagonalizovatelná a

$$||A - A_\varepsilon|| = ||URU^* - U(R + D_\varepsilon)U^*|| = ||UD_\varepsilon U^*|| = ||D_\varepsilon|| < \varepsilon.$$

□

3 Ortogonální transformace

3.1 Givensovy rotace

Definice 3.1 (Matice Givensovy rotace)

Matice
$$G(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}$$
nazveme maticí Givensovy rotace.

Obdobně definujeme $G_{ij}(\varphi)$ (matici elementární Givensovy rotace) pro více rozměrů, kde $G_{ij}(\varphi)$ otáčí v rovině $x_i x_j$.

Poznámka
Vynásobením maticí G. rotace lze např. vynulovat složku vektoru (resp. postupně všechny

až na 1).

$$\sin \varphi = -\frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \cos \varphi = \frac{x_j}{x_i^2 + x_j^2}.$$

3.2 Householderovy reflexe

Definice 3.2

Nechť $q \in \mathbb{R}^n$ a $||q|| = 1$. Pak matici

$$H(q) = I - 2qq^T \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

nazýváme maticí Householderovy reflexe vzhledem k nadrovině určené vektorem q.

Poznámka
Tato matice je zřejmě ortonormální symetrická a $H^2(q) = I$, $\det(H(q)) = -1$.

Věta 3.1 (O zrcadlení)

Nechť jsou dány dva různé vektory $x \in \mathbb{R}^n$ a $y \in \mathbb{R}^m$, $||x|| = ||y||$, a nechť

$$q_1 := \frac{x - y}{||x - y||}, \qquad q_2 := \frac{x + y}{||x + y||}.$$

Potom

$$H(q_1)x = y, \qquad H(q_2)x = -y.$$

Důkaz
Vektor $x - y$ je kolmý k nadrovině zrcadlení vektoru x na vektor y. □

Poznámka
I pomocí Householderovy reflexe se dá nulovat, za y zvolíme $\pm||x||e_1$ a najdeme $H(q)$. Můžeme zde narazit na kancelaci (pokud je první složka x „nejvýraznější“), ale té se vyhneme tak, že správně zvolíme znaménko.

3.3 QR rozklad

Definice 3.3 (QR rozklad, ekonomický tvar)

Buď $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$ obecně obdélníková. Rozklad

$$A = QR,$$

kde Q je matice s ortonormálními sloupci ($Q * Q = I$), R má všechny prvky pod hlavní diagonálou nulové.

Když odstraníme nulové řádky/sloupce, tak dostaneme tzv. ekonomický tvar QR rozkladu.

Poznámka
Lze ho dostat například Gram-Smidtovy ortogonalizace.

Definice 3.4 (Hessenbergův tvar)

Matice v horním Hessenbergově tvaru je matice, která je „skoro horní trojúhelníková“ tak, že má ještě jednu diagonálu (pod hlavní) navíc potenciálně nenulovou.

Poznámka (Použití QR rozkladu)
Řešení soustav, hledání Schurova rozkladu pomocí QR algoritmu: Převedeme na Hessenbergův tvar a následně iteračně $A_i = Q_i R_i$, $A_{i+1} = R_i Q_i$.

Definice 3.5 (QR rozklad pomocí reflexí či rotací)

Vynulujeme poddiagonální prvky A tak, že nejprve vynulujeme téměř celý první sloupec, pak druhý (bez dvou prvků), pak třetí, …

Poznámka
Existence plyne z konstrukce, jednoznačný obecně není (pouze pokud $\operatorname{diag}(R)$ jsou jen kladná čísla).

Poznámka
Dále se probírala projekce, viz LA. (Projektor = matice projekce, komplementární projektor $= I-$ matice projekce). A Gram-Smidt + modifikovaná verze.

Definice 3.6 (Iterační zpřesnění)

Postačuje iterovat dvakrát = projektujeme originální vektor a projektujeme výsledek (= rozdíl originálního vektoru a jeho projekce). (Zde klasický i modifikovaný GS dává podobné)

Definice 3.7 (Cena výpočtu)

Cenu výpočtu měříme jako počet aritmetických operací (tzv. flops).

Poznámka
GS potřebuje $O(n^3)$ operací.

Definice 3.8 (Ztráta ortogonality)

Ztrátu ortogonality matic vypočtených v $\mathbb{F}$ budeme měřit pomocí $||E_Q||_2$, kde $E_Q := \hat{Q}^*\hat{Q} - I$.

Například
Householderův QR rozklad má ztrátu $O(u)$ stejně jako Givensův a ICGS. CGS má $\varkappa^2(A)O(u)$ a MGS má $\varkappa(A)O(u)$.

Poznámka
Householder, Given i MGS jsou zpětně stabilní.

Definice 3.9 (Norma rezidua $A - \hat{Q}\hat{R}$)

Matice $\hat{Q}$ a $\hat{R}$ vypočtené všemi uvažovanými variantami QR rozkladů splňují

$$||A - \hat{Q}\hat{R}|| \approx u||A||.$$

4 LU rozklad

Definice 4.1 (Eliminační matice)

Eliminační matice je $n \times n$ matice M_k, která má na diagonále jedničky, v jednom sloupci má pod touto jedničkou nějaké prvky a jinde jsou nuly.

Poznámka
Součin eliminačních matic je součet jich bez I sečtený s I.

Definice 4.2 (LU rozklad)

LU rozklad je rozklad matice $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ na součin $L \cdot U$, kde L je dolní trojúhelníková s jedničkami na diagonále a U je horní trojúhelníková.

Poznámka
S LU rozkladem lze počítat rovnice tak, že nejprve vyřešíme $Ly = b$ a pak $Ux = y$.

Věta 4.1 (O proveditelnosti GE)

Gausovu eliminaci (bez prohazování řádků) lze provést právě tehdy, je-li matice A silně regulární (tj. každá hlavní (11, 1122, 1133, 1144, ...) podmatice $k \times k$ je regulární).

Důkaz
Indukcí (podíváme se, co se děje s hlavními podmaticemi a zjistíme, že se upravují tak, že jsou regulární právě tehdy, když po úpravách prvek vpravo dole není nulový). □

Lemma 4.2

Je-li $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitovská pozitivně definitní (HPD), pak je silně regulární.

Definice 4.3 (Choleského rozklad)

Nechť A je (HPD). Pak lze provést GE a získat $LU = A = A^* = U^*L^* \implies UL^{-1*}U^* = L^{-1}U^*$ a $D := UL^{-1*}$ je diagonální. Tudíž

$$A = LDL^*.$$

Navíc $\forall x \neq 0 : 0 < (L^*x)^*D(L^*x)$ neboli

$$A = LD^{\frac{1}{2}}D^{\frac{1}{2}}L^* = \tilde{L} \cdot \tilde{L}^*.$$

Tento jednoznačný rozklad nazveme Choleského.

Poznámka
Ch rozklad se používá např. pro určení pozitivní definitnosti matice.

Definice 4.4 (GE s částečnou pivotací (GEPP))

Provádíme GE za pomoci eliminačních matic a zároveň prohazujeme řádky, aby aktuálně zpracovávaný pivot byl co největší (z ještě nepoužitých řádků). (Prohození řádků nám jen prohodí řádky v maticích, nemění to dosavadní hodnoty ani eliminovanou část.)

Tvrzení 4.3 (Proveditelnost GEPP)

GE s částečnou pivotací funguje pro všechny regulární matice.

Důkaz
Zřejmý. □

Tvrzení 4.4 (Zpětná stabilita GE)

$$A + E = \hat{L}\hat{U}$$
$$||E||_\infty \leq 2nu||\hat{L}||_\infty||\hat{U}||_\infty + O(u^2).$$

GE jako taková stabilní není, ale s částečnou pivotací už je tzv. podmíněně stabilní, *jelikož je to GE na $P \cdot A$, kde P je matice permutace a jelikož pro ni $\hat{L} \leq 1$, tedy*

$$\frac{||\Delta A||_\infty}{||A||_\infty} \leq 6n^2 u \frac{||\hat{U}||_\infty}{||A||_\infty} + O(u^2),$$

tedy pokud $\hat{U}$ příliš neroste (pozor, nesouvisí s podmíněností).

Definice 4.5 (Škálování)

Rovnici $Ax = b$ lze přenásobit diagonální maticí, čímž lze zpřesnit algoritmus.

Tvrzení 4.5

Nechť $\hat{L}$ je vypočtený faktor Choleského rozkladu HPD matice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ a nechť $2n^{\frac{3}{2}}u < 1$. Potom pro E takovou, že $A + E = \hat{L}\hat{L}^*$, platí

$$||E||_F \leq \left(\frac{2n^{\frac{3}{2}}}{1 - 2n^{\frac{3}{2}}u} \right) u||A||_F + O(u^2).$$

Definice 4.6

Iterační zpřesnění řešení $Ax = b$ je to, že spočítáme $\hat{x}$, následně reziduum $r = b - Ax$, a s ním jako pravou stranou řešíme další soustavu a výsledek přičteme k $\hat{x}$ a počítáme znovu reziduum…

Předpokládejme, že $n\varkappa(A) \ll 1$. Navíc abychom dosáhli lepšího výsledku, je třeba reziduum spočítat ve vyšší přesnosti než ostatní operace.

Definice 4.7 (Řídká matice)

Matice, kterou je lepší uložit jako seznam nenulových prvků s jejich indexy.

Poznámka
Pro řídké matice je třeba matici nejprve správně zpermutovat než budeme provádět GE, aby nevznikalo moc nových prvků.

5 Singulární rozklad

Věta 5.1 (Vztahy mezi spektrálními rozklady A^*A a $\forall^*$)

Uvažujme spektrální rozklad A^*A. Potom jsou

$$u_j := \frac{Av_j}{\sqrt{\lambda_j}}, \qquad j \in [r],$$

ortonormální vlastní vektory matice AA^* a platí

$$AA^*u_j = \lambda_j u_j, ||u_j|| = 1, \qquad j \in [r].$$

Důsledek
Nenulová vlastní čísla A^*A a AA^* se rovnají. $Av_j = u_j\sqrt{\lambda_j}$.

$u_1, \dots, u_r$ je ortonormální báze $R(AA^*) = R(A)$. Doplníme-li $u_1, \dots, u_r$ na ortonormální bázi prostoru $\mathbb{C}^n$ pomocí $u_{r+1}, \dots, u_n$, dostaneme $N(AA^*) = N(A^*)$.

$U := [u_1, \dots, u_n]$ je unitární a $AA^*U = U \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r, 0, \dots, 0)$.

Definice 5.1 (Singulární čísla)

$Av_j = \sigma_j u_j$, $\sigma_j := \sqrt{\lambda_1}$, $j \in [r]$. σ_j nazveme singulární čísla matice A a označíme

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0.$$

Věta 5.2 (O singulárním rozkladu)

Matici $A \in \mathbb{C}^{n\times m}$ hodnosti r lze rozložit na součin

$$A = U\Sigma V^*,$$

kde $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ a $V \in \mathbb{C}^{m\times m}$ jsou unitární, $\Sigma \in \mathbb{R}^{n\times m}$, kde $\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_r & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $\Sigma_r =$ $\operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r) \in \mathbb{R}^{r\times r}$.

Tvrzení 5.3

Pro HPD matici je singulární rozklad totéž jako spektrální.

Poznámka
Singulární rozklad má také ekonomický tvar i dyadický rozvoj.

Poznámka (Aplikace – normy)
Spektrální a Frobeniovu normu díky tomu spočítáme jako

$$||A|| = ||U\Sigma V^*|| = ||\Sigma|| = \sigma_1,$$

$$||A||_F = ||\Sigma||_F = \sqrt{(\sigma_1^2 + \ \dots + \sigma_r^2)}.$$

Tedy $||A|| \leq ||A||_F \leq \sqrt{r}||A||$ a $\varkappa(A) := ||A|| \cdot ||A^{-1}|| = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$. $\varkappa(A) = 1 \Leftrightarrow \gamma U$, kde $\gamma \neq 0$ a U je unitární.

Definice 5.2 (Zobecnění čísla podmíněnosti)

Zobecníme $\varkappa(A)$ pomocí veličin

$$\min\operatorname{mag}(A) := \max_{||x||=1} ||Ax||, \max\operatorname{mag}(A) := \min_{||x||=1} ||Ax||,$$

jako

$$\varkappa(A) := \frac{\min\operatorname{mag}(A)}{\max\operatorname{mag}(A)}.$$

Definice 5.3 (Pseudoinverze)

Pseudoinverzi (Moore-Penroseovu zobecněnou inverzi) matice $A \in \mathbb{C}^{n\times m}$ definujeme jako $A^\dagger := V\Sigma^\dagger U^*$, kde

$$\Sigma^\dagger = \begin{pmatrix} \Sigma_r^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}.$$

Tvrzení 5.4

Pseudoinverze splňuje následující (a je tím jednoznačně určena):

$$AA^\dagger A = A, \qquad (AA^\dagger)^* = AA^\dagger, \qquad A^\dagger AA^\dagger = A^\dagger, \qquad (A^\dagger A)^* = A^\dagger A.$$

Důkaz

Jednoznačnost se upočítá převodem jedné na druhou pomocí rovností z tvrzení. □

Lemma 5.5 (O vyjádření pseudoinverze)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n\times m}$. Je-li $n \geq m$ a $\operatorname{rank}(A) = m$, potom

$$A^\dagger = (A^*A)^{-1}A^*.$$

Je-li $n < m$ a $\operatorname{rank}(A) = n$, potom $A^\dagger = A^*(AA^*)^{-1}$.

Důkaz

Pro $n \geq m = r$ je V_m unitární čtvercová,

$$A^\dagger = V_m\Sigma_m^{-1}U_m^* = (V_m\Sigma^{-2}V_m^*)(V_m\Sigma U_m^*) = (A^*A)^{-1}A^*.$$

Druhá analogicky. □

Lemma 5.6 (O vzdálenosti nejlepší aproximace hodnoci k)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$. Potom $\forall X \in \mathbb{C}^{n \times m}$ hodnosti $k < r$ je

$$||A - X|| \geq \sigma_{k+1}.$$

Věta 5.7 (Eckart, Young, Mirsky)

Dána $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$ hodnosti r

$$A = \sum_{j=1}^{r} \sigma_j u_j v_j^*.$$

Potom je pro $k < r$ matice

$$A^{(k)} := \sum_{j=1}^{k} \sigma_j u_j v_j^*$$

nejlepší aproximace A hodnosti k, $||A - A^{(k)}|| = \sigma_{k+1}$.

Důsledek

Nejbližší singulární matice k A je $\frac{\sigma_n}{\sigma_1} = \frac{1}{\varkappa(A)}$.

Definice 5.4 (Numerická hodnost)

Numerická hodnost A je takové k, že

$$\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_k \gg \sigma_{k+1} \approx u.$$

Poznámka (Výpočet SVD)

Buď pomocí spektrálního rozkladu AA^* resp. A^*A. To má nevýhodu $\varkappa(A^*A) = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_m^2} = \varkappa(A)^2$.

Nebo algoritmus Golub-Kahan-Reinsch – aplikace Householderových reflexí střídavě zprava a zleva, tím dostaneme tzv. bidiagonální tvar:

$$B = WAQ, W^*W = I, Q^*Q = I.$$

Následně iteračně pomocí varianty QR algoritmu spočítáme singulární rozklad B. Takto dostaneme přesnost až na úrovni u.

6 Problém nejmenších čtverců

Definice 6.1 (Problém nejmenších čtverců (LS))

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$. Problémem nejmenších čtverců (LS) budeme nazývat úlohu

určení $x \in \mathbb{C}^m$, které minimalizuje
$$||b - Ax||.$$

Definice 6.2 (Úplný problém nejmenších čtverců)

Stejně jako LS, jen budeme minimalizovat $[\Delta b, \Delta A]_F$, kde
$$(A + \Delta A)x = b + \Delta b.$$

Věta 6.1 (O řešení LS)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$.
$$x \text{ řeší } LS \;\Leftrightarrow Ax = b|_{R(A)}.$$

Důkaz
V LA. □

Věta 6.2 (Řešení LS a soustava normálních rovnic)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$. Vektor x je řešením problému LS $\Leftrightarrow$ je-li řešením soustavy normálních rovnic,
$$A^* Ax = A^* b.$$

Důkaz
V LA. □

Poznámka
Má-li A plnou sloupcovou hodnost, je $A^* A$ regulární a soustava normálních rovnic má jednoznačné řešení,
$$x = A^\dagger b.$$

Věta 6.3 (Řešení LS minimalní v normě)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$. Potom existuje právě jedno řešení x problému LS minimální v normě a je dáno vztahy
$$Ax = b|_{R(A)} ax \in R(A^*).$$

Důkaz
Rozepíšeme z Pythagorovy věty a omezíme normu. □

Poznámka (Řešení LS)
Buď pomocí $A^*Ax = A^*b$, kde použijeme Choleského rozklad.

Nebo použijeme QR rozklad a řešíme $\min_x ||b - QRx|| = \min_x ||Q^*b - Rx||$ a

$$\begin{pmatrix} Q_m^* b \\ \tilde{Q}_m^* b \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} R_m \\ 0 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} Q_m^* b - R_m x \\ \tilde{Q}_m^* b \end{pmatrix}.$$

Rozšířenou soustavou rovnic (tzv. sedlobodová matice):

$$A^*Ax = A^*b \Leftrightarrow A^*(b - Ax) = 0,$$

$$\begin{pmatrix} I & A \\ A^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b - Ax \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Lemma 6.4 (O sedlobodové matici)

Uvažujme matici

$$C = \begin{pmatrix} B & A \\ A^* & 0 \end{pmatrix},$$

kde $B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je hermitovská pozitivně definitní a $A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $n \geq m$, má plnou sloupcovou hodnost. Potom je C regulární, hermitovská a indefinitní.

Důkaz
Hermitovskost zřejmá, regularita:

$$\begin{pmatrix} B & A \\ A^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \implies \begin{pmatrix} \delta \\ x \end{pmatrix} = 0.$$

Protože pro první rovnici $B\delta + Ax = 0$ přenásobíme A^*B^{-1} a s využitím $A^*\delta = 0$ získáme $A^*B^{-1}Ax = 0$. $A^*B^{-1}A$ je regulářní, tj. $x = 0$ a $B\delta = 0 \implies \delta = 0$.

Indefinitnost dostaneme ze spektrálního rozkladu $C = U\Lambda U^*$. Pro $v \neq 0$, $v = (0, \nu_{n+1}, \ldots, \nu_{n+m})^T$ platí

$$v^*Cv = v^*U\Lambda U^*v = \sum_{j=1}^{m+n} \lambda_j |u_j^* v|^2,$$

tedy musí existovat kladná i záporná čísla. □

Věta 6.5 (LS a rozšířená soustava rovnic)

$A \in \mathbb{C}^{n \times m}$, $n \geq m$, $b \in \mathbb{C}^n$, $\operatorname{rank}(A) = m$. *Řešení x problému LS lze nalézt řešením rozšířené soustavy*

$$\begin{pmatrix} I & A \\ A^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b - Ax \\ x \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Věta 6.6 (LS a singulární rozklad)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n\times m}$, $b \in \mathbb{C}^n$, $A = U_r\Sigma_r V_r^*$ je ekonomický SVD, pak

$$x = A^\dagger b$$

je řešení LS minimální v normě.

Důkaz

Řešení x minimální v normě je dáno jednoznačně

$$Ax = b|_{R(A)} \wedge x \in R(A^*).$$

Ze SVD známe ortogonální projektor na $R(A)$:

$$b|_{R(A)} = (U_r U_r^*)b.$$

Dosazením za A a $b|_{R(A)}$ dostaneme

$$U_r\Sigma_r V_r^* x = U_r U_r^* b,$$

$$V_r^* x = \Sigma_r^{-1} U_r^* b.$$

Ve V_r je ortonormální báze $R(A)$ a $x \in R(A^*) \implies x = V_r y$. Dosazením dostaneme $y = V_r^* x = \sigma_r^{-1} U_r^* b$. □

7 Klasické iterační metody

Definice 7.1 (Matrixfree computation)

Výpočet s maticí, kterou ani nemáme nikde uloženou (jen mohu např. dopočítávat její prvky).

Poznámka

Když provádíme matrixfree výpočty nebo výpočty s velmi řídkými metodami, tak rozklady nefungují a musíme použít iterační metody.

Definice 7.2 (Částečný problém vlastních čísel)

Úkolem je nalézt část vlastních čísel. (Úplný problém vlastních čísel, tj. najít všechna čísla se musí řešit Schurovým rozkladem.)

Definice 7.3 (Mocninná metoda)

Nechť $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je diagonalizovatelná, $A = S\Lambda S^{-1}$, $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$ vlastní čísla A, $|\lambda_1| \geq |\lambda_2| \geq \ldots \geq |\lambda_n|$, $S = [s_1, \dots, s_n]$ normované vlastní vektory.

Pro jednoduchost nechť $|\lambda_1| > |\lambda_2|$. Nechť v je nenulový startovací vektor. Mocninná metoda je pak: $v_0 = \frac{v}{||v||}$ následované opakováním $w = Av_{k-1}$, $v_k = \frac{w}{||w||}$, $\mu_k = v_k^* A v_k$.

Poznámka
$v_k = \frac{A^k v}{||A^k v||}$, neboť v_k je A k-krát aplikované na v_0 dělené nějakými čísly, ale víme, že $||v_k|| = 1$. Tedy (za předpokladu $\zeta_1 \neq 0$)

$$A^k v = \sum_{j=1}^{n} \zeta_j \lambda_j^k s_j, \qquad v_k = \frac{A^k v}{||A^k v||} = \frac{\zeta_1 \lambda_j^k \cdot \sum_{j=2}^{n} \frac{\zeta_j}{\zeta_1} \left(\frac{\lambda_j}{\lambda_1}\right)^k s_j}{|\zeta_1 \lambda_1^k| \cdot ||\ldots||} \to e^{i\alpha_k} s_1,$$

tj. $v_k \to e^{i\alpha_k} s_1$, $\mu_k = v_k^* A v_k \to \lambda_1$.

Definice 7.4 (Modifikace mocninné metody)

$Ax = \lambda x \Leftrightarrow A^{-1}x = \frac{1}{\lambda}x$. Tedy spočítáme LU rozklad a pomocí něho $w = A^{-1}v_{k-1}$ jako řešení

$$Aw = v_{k-1}.$$

Navíc pokud známe aproximaci μ vlastního čísla λ, pak můžeme pomocí

$$Ax = \lambda x \Leftrightarrow (A - \mu I)x = (\lambda - \mu)x \Leftrightarrow (A - \mu I)^{-1} x = \frac{1}{\lambda - \mu} x,$$

kde budu hledat $\frac{1}{\lambda - \mu}$ jako největší vlastní číslo $(A - \mu I)^{-1}$.

Definice 7.5 (Obecné iterační schéma)

Formálně rozštěpíme A na $A = M - N$, kde M je regulární a systém s M je lehce řešitelný. Potom

$$Ax = b \Leftrightarrow (M - N)x = b \Leftrightarrow Mx = Nx + b.$$

Iterační proces je pak, že x_0 je dáno a $Mx_k = Nx_{k-1} + b$. Použijeme-li $Mx = Nx + b$, dostáváme

$$M(x - x_k) = N(x - x_{k-1}),$$

$$x - x_k = M^{-1}N(x - x_{k-1}) = \ldots = \left(M^{-1}N\right)^k.$$

Tedy pokud $\left(M^{-1}N\right)^k$ konverguje k 0, tak nám chyba konverguje k 0.

$M^{-1}N$ můžeme přepsat jako $I - M^{-1}A$. Ideálně tedy $A \approx M$. Stejně tak $Mx_k = Nx_{k-1} + b$ můžeme přepsat na $x_{k-1} + M^{-1}(b - Ax_{k-1})$, kde $r_{k-1} := b - Ax_{k-1}$ nazveme reziduum.

Definice 7.6 (Spektrální poloměr)

Pro $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ nazveme $\varrho(B) := \max\{|\lambda| | \lambda$ je vlastní číslo $B\}$ spektrálním poloměrem matice B.

Věta 7.1 (Oldenburgova)

Nechť $B \in \mathbb{C}^{n\times n}$. Platí

$$B^k \to 0 \Leftrightarrow \varrho(B) < 1.$$

Důkaz

Jordanův rozklad. □

Důsledek

Posloupnost x_k generovaná

$$x - x_k = (M^{-1}N)^k (x - x_0)$$

konverguje k řešení $\forall x_0$ právě tehdy, když

$$\varrho(M^{-1}N) < 1.$$

Tvrzení 7.2 (Postačující podmínka konvergence iteračního schématu)

$||M^{-1}N|| < 1 \implies \varrho(M^{-1}N) < 1$, *kde $||\cdot||$ je generovaná nebo Frobeniova norma.*

Důkaz

$$|\lambda| = ||\lambda v|| = ||Bv|| \leq ||B||.$$

□

Poznámka

Platí pro každou multiplikativní normu.

Definice 7.7 (Richardsonova metoda)

$M = \frac{1}{\omega}I$, $N = \frac{1}{\omega}I - A$, iterační matice je pak $I - \omega A$ a iterační schéma

$$x_k = x_{k-1} + \omega(b - Ax_{k-1}).$$

Vhodná, pokud je A blízká násobku jednotkové matice.

Definice 7.8 (Jacobiova iterační metoda)

Dále uvažujme štěpení ve tvaru $A = D - L - U$, kde D je diagonála, L je dolní trojúhelníková a U je horní. Pak (pokud jsme A zpermutovali tak, aby na diagonále nebyly 0)

$$M = D, N = L + U,$$

iterační matice je $I - D^{-1}A$, iterační schéma $x_k = x_{k-1} + D^{-1}(b - Ax_{k-1})$.

Vhodná, pokud je A blízká diagonální matici.

Definice 7.9 (Gauss-Seidelova metoda)

Většinou Jacobiovu iterační metodu najdeme rozepsanou po složkách:

$$\zeta_{k,i} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(- \sum_{j=1, j \neq i}^{n} A_{i,j} \zeta_{k-1,j} + b_i \right).$$

Tady můžeme dokonce využít i již spočtené složky ($\zeta_{j,k}$ pro $j < i$), tedy přesněji spočítané složky, pak dostaneme tzv Gauss-Seidelovu metodu. Navíc si stačí pamatovat jen 1 vektor.

Definice 7.10 (Superrelaxační metoda)

$$A = \frac{1}{\omega} D - L - \left[(\frac{1}{\omega} - 1) D + U \right].$$

Tou se dále nebudeme zabývat.

Definice 7.11 (Ostře diagonálně dominantní)

O matici $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ budeme říkat, že je ostře diagonálně dominantní, pokud

$$\sum_{j=1, j \neq i}^{n} |a_{i,j}| < |a_{i,i}|, \forall i \in [n].$$

Věta 7.3 (Ostře diagonálně dominantní matice)

Je-li $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ostře diagonálně dominantní, pak aproximace x_k spočtené Jacobihe nebo Gauss-Seidelovou metodou konvergují k řešení $Ax = b$ pro libovolné počáteční přiblížení x_0.

Důkaz
Stačí ukázat $||D^{-1}(L+\ U)|| < 1$ pro nějakou generovanou maticovou normu. Zvolme $||\cdot||_\infty$. Platí (jelikož A je ostře diagonálně dominantní).

$$||D^{-1}(L+\ U)||_\infty = \max_{1\le i\le n} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \frac{|a_{i,j}|}{|a_{i,i}|} < 1.$$

Ukažme $||(D-L)^{-1}U||_\infty < 1$: Generovaná norma $\implies \exists v, ||v||_\infty = 1$:

$$||(D-L)^{-1}U||_\infty = ||(D-L)^{-1}Uv||_\infty =: ||u||_\infty$$

a platí

$$(D-L)u = Uv.$$

Nechť s je takové, že $|u_s| = ||u||_\infty$. Pak

$$\sum_{i=1}^{s} a_{s,i}u_i = -\sum_{i=s+1}^{n} a_{s,i}v_i$$

a odtud

$$||u||_\infty = |u_s| \le ||u||_\infty \underbrace{\sum_{i=1}^{s-1} |\frac{a_{s,i}}{a_{s,s}}|}_{\alpha} + \underbrace{\sum_{i=s+1}^{n} |\frac{a_{s,i}}{a_{s,s}}|}_{\beta}.$$

Platí $\alpha + \beta < 1$ (ostře diagonálně dominantní) a

$$||u||_\infty \le \frac{\beta}{1-\alpha} < 1.$$

□

Věta 7.4 (Pozitivně definitní matice)

Je-li $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitovská pozitivně definitní, pak x_k generované GS metodou konvergují k řešení $Ax = b$ pro každé x_0.

Důkaz

$$A = D - L - L^* = \sqrt{D}\sqrt{D} - L - L^*.$$

Chceme ukázat, že vlastní čísla iterační matice $G := (D-L)^{-1}L^*$ leží uvnitř jednotkového kruhu.

$$G = \frac{1}{\sqrt{D}}(I - \underbrace{\frac{1}{\sqrt{D}}L\frac{1}{\sqrt{D}}}_{Z})^{-1}\underbrace{\frac{1}{\sqrt{D}}L^*\frac{1}{\sqrt{D}}}_{Z^*}\sqrt{D},$$

tj. G je podobná $(I-Z)^{-1}Z^*$. Uvažujme vlastní pár (λ, v) této matice

$$(I-Z)^{-1}Z^*v = \lambda v, v^*v = 1.$$

Potom

$$v^*Z^*v = \lambda v^*(I-Z)v = \lambda(1 - v^*Zv),$$

$$\lambda = \frac{v^*Zv}{1 - v^*Zv},$$

Stačí ukázat (z rozepsání), že $1 - 2\Re(v^*Zv) > 0$. Matice

$$D^{-\frac{1}{2}}(D - L - L^*)D^{-\frac{1}{2}} = I - Z - Z^*$$

je pozitivně definitní a proto

$$0 < v^*(I - Z - Z^*)v = 1 - 2\Re(v^*Zv).$$

□

Definice 7.12 (Přechodový jev)

Přechodový jev je jev, kdy se při iterační metodě (při $||I - M^{-1}A|| > 1$ a $\varrho(I - M^{-1}A) < 1$) stane, že se na chvíli x_k začne zase vzdalovat od řešení.

8 Metody Krylovových podprostorů

Definice 8.1 (Krylovův podprostor)

Prostor

$$\mathcal{K}_k(A, v) := \operatorname{span}\left\{v, Av, A^2v, \ldots, A^{k-1}v\right\},$$

se nazývá k-tý Krylovův podprostor generovaný A a v.

Platí $w_{k-1} \in \mathcal{K}_k(A, w)$, $x_k \in \mathcal{K}_k(A, b)$.

Definice 8.2 (Metoda sdružených gradientů)

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symetrická, pozitivně definitní, problém $Ax = b$. Označme x_* řešení. A, b definují kvadratický funkcionál $\mathcal{F} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$

$$\mathcal{F}(x) := \frac{1}{2}x^T Ax - x^T b,$$

jelikož je A pozitivně definitní a symetrická, tak definuje skalární součin a normu. Platí

$$\mathcal{F}(x) = \frac{1}{2}x(x_* - x)^T A(x_* - x) - \frac{1}{2}x_*^T Ax_* = \frac{1}{2}||x_* - x||_A^2 - \frac{1}{2}||x_*||_A^2 = \frac{1}{2}||x_* - x||_A^2 + \mathcal{F}(x_*).$$

Tudíž $Ax_* = b \Leftrightarrow x_*$ minimalizuje $\mathcal{F}$.

Funkcionál budeme minimalizovat tak, že $x_{k+1} = x_k + \gamma_k p_k$, kde γ_k je správná velikost a p_k správný směr. Protože $\mathcal{F}$ je kvadratický, můžeme volit $\gamma_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}$, kde $r_k := b - Ax_k$ je reziduum.

O reziduu víme

$$r_{k+1} = r_k - \gamma_k A p_k,$$

tedy nemusíme pro jeho výpočet znovu násobit.

Volbou $p_k = r_k$ dostaneme metodu největšího spádu. Tato metoda však může konvergovat velmi pomalu.

Definice 8.3 (Volba směrového vektoru)

TODO.

Věta 8.1 (O metodě sdružených směrů)

Buď $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ symetrická pozitivně definitní, $b \in \mathbb{R}^n$. Nechť $\{p_i\}_{i=0}^{n-1}$ tvoří A-ortogonální bázi $\mathbb{R}^n$ a nechť $x_0 \in \mathbb{R}^n$ je libovolné počáteční přiblížení. Uvažujme posloupnost vektorů $x_{k+1} = x_k + \gamma_k p_k$, kde

$$\gamma_k = \frac{p_k^T r_k}{p_k^T A p_k}, \qquad r_k = b - Ax_k.$$

Potom $x_n = x_*$, kde x_* je řešení systému $Ax = b$. Navíc platí, že $x_k - x_0$ je A-ortogonální projekcí počáteční chyby $x_* - x_0$ na prostor $S_k := \operatorname{span}\{p_0, \dots, p_{k-1}\}$.

Důkaz
Vyjádřeme $x_* - x_0$ v bázi $p_0, \ldots, p_{n-1}$,

$$x_* - x_0 = \sum_{i=1}^{n-1} \alpha_i p_i, \qquad \alpha_i = \frac{p_i^T A(x_* - x_0)}{p_i^T A p_i}.$$

Z definice metody plyne

$$x_k - x_0 = \gamma_0 p_0 + \ldots + \gamma_{k-1} p_{k-1}$$

a pro další koeficient γ_k platí

$$\gamma_k = \ldots = \alpha_k.$$

Koeficienty γ_i se rovnají koeficientům α_i a $x_n = x_0 + \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i p_i = x_*$.

Navíc

$$x_* - x_0 = (x_k - x_0) + (x_* - x_k)$$

a $x_* - x_0 \perp_A S_k$. □

Důsledek
$\mathcal{F}(x_k) = \min_{x \in x_0 + S_k} \mathcal{F}(x)$.

Navíc

$$x_* - x_k \perp_A S_k \Leftrightarrow r_k \in S_k.$$

Poznámka (Jak generovat A-ortogonální bázi, metoda sdružených gradientů)
Pokud r_{k+1} je nulové, tak r_{k+1} je řešení, jinak $r_{k+1} \perp S_{k+1} = \operatorname{span}\{p_0, \ldots, p_k\}$. K rozšíření ortogonální báze použijeme reziduum r_{k+1}:

$$p_{k+1} = r_{k+1} - \sum_{j=0}^{k} c_{k,j} p_j, \qquad c_{k,j} = \frac{\langle r_{k+1}, p_j \rangle_A}{\langle p_j, p_j \rangle_A}.$$

Abychom si nemuseli pamatovat všechna p_j, tak si všimneme, že

$$c_{k,j} = \frac{r_{k+1}^T A p_j}{p_j^T A p_j} = 0, \qquad j < k.$$

Tj. $p_{k+1} = r_{k+1} - c_{k,k} p_k$.

TODO kosmetické úpravy výpočtů.

Lemma 8.2 (CG a Krylovovy podprostory)

Po k iteracích metody sdružených gradientů s $r_j \neq 0$, $j \in [k]$, platí

$$S_{k+1} = \mathcal{K}_{k+1}(A, r_0).$$

Důkaz
Indukcí: pro $k = 0$ platí triviálně. Nechť $S_k = \mathcal{K}_k(A, r_0)$. Pak z

$$r_k = r_{k-1} - \gamma_{k-1} A p_{k-1}, \qquad p_k = r_k + \delta_k p_{k-1}$$

plyne $p_k, r_k \in \mathcal{K}_{k+1}(A, r_0)$, a proto

$$S_{k+1} \subseteq \mathcal{K}_{k+1}(A, r_0).$$

Z lineární nezávislosti $r_0, \ldots, r_k$ pak plyne rovnost. $\square$

TODO.

Definice 8.4 (Stupeň vektoru vzhledem k matici)

Maximální dimenzi, jež mohou Krylovy podprostory generované maticí A a vektorem v dosáhnout, budeme nazývat stupněm v vzhledem k A a značit $d(A, v)$.

Definice 8.5 (Arnoldiho algoritmus)

Báze $v, Av, \ldots, A^{k-1}v$ Krylovových podprostorů není vhodná k výpočtům (je velmi podmíněná). Chtěli bychom ortogonální bázi. Nechť $k < d(A, v)$ a nechť $v_1, \ldots, v_k$ splňují

$$v_{i_1} \in \mathcal{K}_{i+1}(a, v) \setminus \mathcal{K}_i(A, v), \operatorname{span}\left\{v_{[i]}\right\} = \mathcal{K}_i(A, v), i \in [k-1].$$

Potom $Av_k \in \mathcal{K}_{k+1}(A, v) \setminus \mathcal{K}_k(A, v)$. Idea je projekce:

$$w = A_{v_k} - \sum_{i=1}^{k} h_{i,k} v_i, \qquad v_{k+1} = \frac{w}{||w||},$$

kde $h_{i,k}$ jsou vhodně zvolené koeficienty, aby $w \perp v_i$.

Tomuto algoritmu se říká Arnoldiho algoritmus a najde ortogonální bázi celého invariantního prostoru $\mathcal{K}_d(A, v)$. Je to vlastně QR rozklad matice $(v_1|Av_1|\ldots|Av_k)$.

Definice 8.6 (Arnoldiho metoda)

TODO.

Definice 8.7 (Lanczosův algoritmus)

Arnoldiho algoritmus na symetrickou A se nazývá Lanczosův algoritmus. Ortogonální bázi Krylovova prostoru lze pro symetrickou matici A počítat tříčlennou rekurencí.

Část II

Matematická analýza

9 Nelineární algebraické rovnice

Definice 9.1 (Nelineární algebraické rovnice)

Základním problémem je, že máme *spojitou* funkci $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ a hledáme $f(x_*) = 0$.

Definice 9.2 (Metoda bisekce (půlení intervalů))

Na začátku potřebujeme dva body, kde je funkce kladná a záporná. Dokud je interval větší než požadovaná přesnosti, tak interval rozpůlíme a zahodíme jeden z původních bodů tak, aby funkce v zbylých bodech byla zase kladná a záporná.

Z Darbouxovy věty víme, že mezi dvěma body v libovolné iteraci algoritmu je x_*. Zároveň interval se zmenšuje vždy na polovinu (to je pomalé, ale jisté). Nedá se zobecnit na soustavy.

Definice 9.3 (Regula falsi)

Jako bijekce, jen nepůlíme, ale dělíme interval v poměru funkčních hodnot (vezmeme kořen lineární funkce, která odpovídá funkční hodnotě v těchto 2 bodech). Obecně je rychlejší než bijekce, ale někdy je pomalejší. Stále vždy funguje.

Definice 9.4 (Newtonova metoda (metoda tečen))

Pracujeme pouze s jedním bodem x_0. Vychází z $0 = f(x_*) = f(x_0)+f'(x_0)(x_*-x_0)+R \implies x_* \approx x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$.

Problém je, že metoda konverguje jen lokálně, jinak se můžeme naopak vzdalovat nebo se zacyklit. Dokonce platí věta (Li-Yoshe), že pro polynom s alespoň 3 různými kořeny v $\mathbb{R}$ a $p \in \mathbb{N}$ existuje x_0, tak, že Newton má periodu p. Nebo může nastat úplný chaos.

Definice 9.5 (Řád konvergence, rychlost konvergence)

Mějme posloupnost $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$, $x_n \to x_*$, $e_n := x_n - x_*$ je chyba v n-té iteraci.

Nechť $\exists p > 0$, $c > 0$: $\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}}{e_n}^p = C$, řekneme, že $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ má řád konvergence p. Metoda je řádu p, jestliže $\forall$ posloupnost generovaná touto metodou má řád alespoň p a alespoň jedna posloupnost má řád přesně p.

Věta 9.1 (Lokální kvadratická konvergence Newtona)

Předpokládejme $f \in C^2([a,b])$, $f'(x_*) \neq 0$, $\exists x_* \in (a,b)$, x_0 je dostatečně (dá se rigorózně napsat jak) blízko x_*. Pak $\{x_n\}_{n=0}^{\infty}$ z Newtonovy metody konverguje kvadraticky k x_*.

Důkaz

1. Nechť $x_k \to x_*$, dokážeme že konverguje kvadraticky:

$$0 = f(x_*) = f(x_k) + f'(x_k)(x_* - x_k) + \frac{1}{2}f''(\xi_k)(x_* - x_k)^2, \qquad \xi_k \in [x_k, x_*].$$

$$-\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} + x_k - x_* = \frac{1}{2}\frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)}(x_k - x_*)^2 \implies e_{k+1} = \frac{1}{2}\frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)}e_k^2 \implies$$

$$\lim_{k\to\infty}\frac{|e_{k+1}|}{|e_k|^2} = \lim_{k\to\infty}\frac{1}{2}\left|\frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)}\right| = \frac{1}{2}\frac{f''(x_*)}{f'(x_*)} = C > 0.$$

2. $x_k \to x_*$: $e_{k+1} = \frac{1}{2}\frac{f''(\xi_k)}{f'(x_k)}e_k^2$. $|f''|$ omezená na $[a,b]$, $f'(x_*) \neq 0$, f' je spojitá $\implies$ $\exists U \in \mathcal{U}(x_*) : |f'| > 0$ na U. Tedy

$$\exists M < \infty : \left|\frac{f''(x)}{f'(y)}\right| \leq M \forall x, y \in U.$$

$$|e_{k+1}| \leq \frac{1}{2}M|e_k| \cdot |e_k| \leq \frac{1}{2}|e_k|$$

pro dostatečně malé e_k. □

Poznámka (Cayley 1879)
Newton funguje i pro $\mathbb{C}$. Ale je nemožné uhádnout, ke kterému kořeni. Viz `https://demonstrations.wolfram.com/ComplexNewtonIterationForACubicPolynomial/`

Definice 9.6 (Zastavovací kritéria)

Konvergence, splnění nerovnice,

Absolutní = nezávisí na hodnotě cíle, relativní = chybu měřím relativně vůči hodnotě cíle.

Definice 9.7 (Modifikace Newtona)

Diference: místo derivace používáme diferenci.

Metoda sečen: použijeme $x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{x_k - x_{k-1}}}$. (Řád $= \frac{1+\sqrt{5}}{2}$.)

9.1 Iterace funkcí

Definice 9.8 (Iterace funkcí)

$f(x_*) = 0$. Metoda $x_{k+1} = g(x_k)$. Nechť $x_k \to x_*$, g spojité, pak $x_* = g(x_*)$.

Definice 9.9 (Kontrakce)

$g : [a, b] \to \mathbb{R}$ je kontrakce (kontrahující), pokud $\exists L < 1$:

$$\forall x, y \in [a, b] : |g(x) - g(y)| \leq L|x - y|.$$

Tj. g je L-lipschitzovská $L < 1$.

Věta 9.2 (Banachova věta o kontrakci)

Nechť $g : [a, b] \to [a, b]$ je kontrakce. Pak $\exists!$ pevný bod $x_* \in [a, b]$. Dále $\forall x_0 \in [a, b] : x_k \to x_*$, kde $x_{k+1} = g(x_k)$. Platí odtud $|x_k - x_*| \leq \frac{L^k}{1-L}|x_1 - x_0| \to 0$ pro $k \to \infty$.

Důkaz

$$|x_k - x_{k-1}| = |g(x_{k-1}) - g(x_{k-2})| \leq L|x_{k-1} - x_{k-2}| \leq \ldots \leq L^{k-1}|x_1 - x_0|.$$

$\{x_k\}$ je cauchyovská: $k > l : |x_k - x_l| \leq (L^{k-1} + \ \ldots + L^l)|x_1 - x_0| \leq \frac{L^l}{1-L}|x_1 - x_0| \to 0$. Tj. $\exists x_* : x_k \to x_*$. g je kontrahující, tedy g je spojitá $\implies g(x_*) = g(\lim_{n\to\infty} x_n) = \lim_{n\to\infty} g(x_n) = \lim_{n\to\infty} x_{n+1} = x_*$. □

Poznámka (Soustavy nelineárních rovnic)
Jsou složitější, výpočetní náklady velmi rostou s N. Lze použít Newtonovu metodu ($x_{k+1} = x_k - J_f(x_k)^{-1}F(x_k)$).

10 Optimalizace

Definice 10.1 (Optimalizace, nepodmíněná a podmíněná optimalizace)

Máme $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ a chceme $\overline{x} = \arg\min_{x\in M} f(x)$, kde $M \subseteq \mathbb{R}^n$. Pokud $M = \mathbb{R}^n$, pak je to nepodmíněná, jinak podmíněná.

Minimum můžeme hledat i lokální (a většinou nic víc neumíme).

10.1 Minimalizace v $\mathbb{R}$

Definice 10.2 (Metoda zlatého řezu)

Podobně jako metoda bisekce, jen se podíváme na funkční hodnoty ve dvou bodech a posuneme kraj intervalu, který je „u“ větší hodnoty do daného bodu.

Body budeme volit tak, abychom mohli „recyklovat“ spočtené funkční hodnoty. Tedy pokud jsou krajní body a, b, tak nové body zvolíme $a + \varrho(b - a)$ a $b - \varrho(b - a)$, kde ϱ je 1− zlatý řez.

Poznámka
Vždy funguje. (Ale hledá pouze lokální minimum.)

Definice 10.3 (Newtonova metoda pro minimalizaci)

Jako Newtonova metoda. Aproximujeme $f \approx p$, p kvadratický polynom, $\overline{x} \approx \arg\min p$. Pokud je $f \in C^2(\mathbb{R})$, zvolíme

$$f(x) \approx f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{1}{2} f''(x_0)(x - x_0)^2.$$

Pak hledáme $p'(x) = 0$, tj. $f'(x_0) + f''(x_0)(x - x_0) = 0$. Tedy iterujeme $x_{k+1} = x_k - \frac{f'(x_k)}{f''(x_k)}$. Je to vlastně Newtonova metoda pro hledání $f'(x) = 0$.

10.2 Optimalizace v $\mathbb{R}^n$

Definice 10.4 (Spádový směr)

Dáno $x \in \mathbb{R}^n$, pak směr $d \in \mathbb{R}^n$ je spádový, pokud $\exists \overline{\alpha} > 0 : f(x + \alpha d) < f(x) \forall \alpha \in (0, \overline{\alpha})$.

Definice 10.5 (Metody spádových směrů)

Dáno $x_0 \in \mathbb{R}^n$, chceme $\{x_k\}_{k \in \mathbb{N}}$, $x_k \to \overline{x}$. Hledáme tuto posloupnost tvaru $x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k$, kde d_k je směr a $\alpha \in \mathbb{R}^+$ je koeficient tak, aby $f(x_{k+1}) < f(x_k)$.

Lemma 10.1

Nechť $\exists \nabla f(x)$, pak d je spádový směr v $x \Leftrightarrow \nabla f(x) \cdot d < 0$.

Důkaz
Triviální. □

Lemma 10.2 (Metoda největšího spádu)

Největší spád ma f ve směru $-\nabla f(x)$.

Důkaz
BÚNO $||d|| = 1$. Derivace f ve směru d, tj. $\nabla f(x) \cdot d$, chceme co nejzápornější. Z Cauchy-Swarze:

$$|\nabla f(x) \cdot d| \leq ||\nabla f(x)|| \cdot ||d|| \implies \nabla f(x) \cdot \geq -||\nabla f(x)||.$$

Pro $d = \frac{-\nabla f(x)}{||\nabla f(x)||}$ je $\nabla f(x) \cdot d = -||\nabla f(x)||$ a větší spát z nerovnosti výše být nemůže. □

Poznámka (Volba α_k)
$\alpha_k = \alpha$ dostatečně malé.

$\alpha_k \to 0$, ale $\sum_k \alpha_k = \infty$, abychom mohli kamkoliv dokonvergovat, tedy například $\alpha_k = \frac{1}{k}$.

Line search: $g(\alpha) = f(x_k - \alpha d_k)$, a minimalizujeme $g(\alpha)$ – 1D problém a stačí přibližně.

Přesný line search $\alpha_k = \arg\min_{\alpha>0} g(\alpha)$. (Špatná – zig-zag efekt, dá se dokázat, že d_k a d_{k+1} jsou na sebe kolmé, takže konverguje velmi pomalu).

Definice 10.6 (Newtonova metoda)

Funguje úplně stejně i pro $\mathbb{R}^n$. Může se však stát, že nenajdeme (stejně jako v $\mathbb{R}$, ale tady je efekt markantnější, proto ho bereme zde) minimum, ale např. inflexní bod.

Netrpí zig-zag efektem.

Lemma 10.3

Nechť $\exists \nabla f(x) \neq 0$. Nechť B je pozitivně definitní matice, pak $-B\nabla(x)$ je spádový směr v bodě x.

Důkaz
$\nabla f(x) \cdot (-B\nabla f(x)) = -\nabla f(x)^T B \nabla f(x) < 0$, tj. $-B\nabla f(x)$ je spádový směr. □

Důsledek
Newton $-(\nabla^2 f(x_k))^{-1} \nabla f(x_k)$ je spádový směr, pokud $\nabla^2 f(x_k)$ je pozitivně definitní.

Definice 10.7 (Obecný algoritmus)

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k M_k \nabla f(x_k),$$

kde M_k je pozitivně definitní a α_k určíme pomocí line search.

Poznámka
Volba M_k: id = metoda největšího spádu, $(\nabla^2 f(x_k))^{-1}$ = Newton + line search, $(\operatorname{diag} \nabla^2 f(x_k))^{-1}$ = diagonální aproximace Newtona, $(\beta_k \operatorname{id} + \nabla^2 f(x_k))^{-1}$ = kompromis mezi největším spádem a Newtonem (užitečné, pokud $\nabla^2 f(x_k)$ není pozitivně definitní).

11 Ortogonální polynomy

Viz MA3 nebo UFA. Konstrukce Gram-Schmidtem jako v UFA.

Věta 11.1 (Tříčlenná rekurence)

$\exists A_n, B_n \in \mathbb{R} : \varphi_{n+1}(x) = (x + A_n)\varphi_n(x) + B_n\varphi_{n-1}(x)$. *($\varphi_n$ je polynomiální ortonormální báze prostoru polynomů.)*

Důkaz
$x\varphi_n(x) \in P_{n+1}$ (prostor polynomů stupně nejvýše $n+1$) $\implies x\varphi_n(x) = \alpha_{n+1}\varphi_{n+1}(x) + \dots + \alpha_0\varphi_0$. TODO $\square$

Definice 11.1 (Legenderovy polynomy)

$(a, b) = (-1, 1)$, $w(x) = 1$, tj. $(f, g) = \int_{-1}^{1} fg dx$. Vyjde $1, x, \frac{2}{(}3x^2 - 1), \dots$ Rekurence vyjde $(n+1)\mathcal{L}_{n+1}(x) = (2n+1)x\mathcal{L}_n(x) - n\mathcal{L}_{n-1}(x)$.

Definice 11.2 (Čebyševovy polynomy)

Na $(-1, 1)$, $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$.

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x).$$
$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x).$$

Důkaz (Ortogonalita)
Zintegruje se a zasubstituuje. $\square$

Věta 11.2

Nechť p_n je monický polynom stupně n. Pak $\max_{x\in[-1,1]} |p_n(x)| \geq \max_{x\in[-1,1]} |T_n(x)| = \frac{1}{2^{n-1}}$.

Důkaz
1. $|T_n|$ nabývá maxima v bodech $x_k = \cos\frac{k\pi}{n}$, $k = 0, \dots, n$. Platí $T_n(x_k) = \frac{(-1)^k}{2^{n-1}}$.

2. Sporem: Nechť $\exists p_n : \max_{[-1,1]} |p_n| < \frac{1}{2^{n-1}}$. Definujeme $m = T_n - p_n$. Pak $m(x_k) = \frac{(-1)^k}{2^{n-=1}} - p_n(x_k) \implies m(x_k) > 0$ pro k sudé a < 0 pro k liché, tj. $\forall k \in [n]\ \exists$ kořen polynomu $m \in (x_k, x_{k+1})$, ale m má stupeň nejvýše $n-1$, tedy $m = 0$, což je spor s $p_n < T_n$. $\square$

12 Interpolace

Definice 12.1 (Interpolace)

Máme zadanou funkční hodnoty v nějakých bodech a snažíme se najít funkci, která je tam má.

Definice 12.2 (Lagrangeova interpolace)

Dáno $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ a $a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_n \leq b$. Hledáme $L_n \in P_n : L_n(x_i) = f(x_i)$, $i \in [n]$.

Definice 12.3

Říkáme, že L_n interpoluje f v uzlech $\{x_i\}_{i=0}^n$.

Definice 12.4 (Lagrangeovy polynomy)

$l_i(x_j) = \delta_{ij}$, tj. $l_i(x) = \prod_{k\in[n]\setminus\{i\}} \frac{(x-x_k)}{(x_i-x_k)}$, $i \in [n]$.

Věta 12.1

Dány f, $\{x_i\}_{i=0}^n$ jako výše. Pak $\exists! L_n \in P_n$ interpolující f v uzlech $\{x_i\}$, platí $L_n(x) = \sum_{i=0}^n l_i(x) f(x_i)$.

Důkaz je triviální.

L_n se nazývá Lagrangeův interpolační polynom.

Věta 12.2 (Odhad chyby L, Cauchy)

Nechť $f \in \mathbb{C}^{n+1}[a,b]$, $a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_n \leq b$, L_n = Lagrangeův interpolační polynom. Pak $\forall x \in [a,b]\ \exists \xi_x \in [a,b]$:

$$f(x) - L_n(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi_x) \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

Důkaz
Pokud $x = x_i$, pak $f(x) - L_n(x) = 0 = \ldots \cdot 0$.

Pokud $x \neq x_i$ $\forall i$, pak zafixujeme x a definujeme si pomocné funkce $g(t) = f(t) - L_n(t) - (f(x) - L_n(x)) \prod_{i=0}^{n} \frac{t-x_i}{x-x_i}$. $g(x_i) = 0$ a $g(x) = 0$. $g(t)$ má $n+2$ různých kořenů $x_0, \ldots, x_n, x$. Navíc $g \in C^{n+1}[a,b]$. Z Rolleovy věty má $g'(t)$ $n+1$ různých kořenů (mezi každými x_i nebo x). $g''(t)$ má n různých kořenů... $g^{(n+1)}(t)$ má 1 kořen v $[a,b] \implies \exists \xi_x \in [a,b] : g^{(n+1)}(\xi_x) = 0$.

Vyjádříme a dostaneme výraz ze znění. □

Poznámka (Konvergence)
$L_n \to f$ pro $n \to \infty$? Ne. (Tzv Rungeho jev. Například $f(x) = \frac{1}{1+25x^2}$.)

Definice 12.5 (Čebyševova interpolace)

Lepší volba x_i = uzly čebyševova polynomu, tedy $\cos\left(\frac{2i-1}{2n}\pi\right)$ na $[-1,1]$. Pak $\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)$ je nejmenší možný (co do maxima).

Zde $\forall f \in C^1[a,b]$, pak $L_n \rightrightarrows f$.

Definice 12.6 (Extrapolace)

Interpolace na $[a,b]$ a chceme odhad $f(x)$ pro $x \notin [a,b]$.

Čebyševovy polynomy se na to absolutně nehodí (nejrychleji rostou mimo interval).

Hermiteova interpolace: Snažíme se najít polynom tak, aby měl stejné i derivace do j-tého stupně.

12.1 Spline funkce

Definice 12.7 (Lineární interpolační spline)

Dáno $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ a $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, $x_{i+1} - x_i = h$. Hledáme funkci S_L:

$$S_L \in C[a,b], S_L|_{I_i} \text{ je lin. funkce}, S_L(x_i) = f(x_i).$$

Dostáváme $S_L(x)|_{I_i} = \frac{x_{i+1}-x}{h} f(x_i) + \frac{x-x_i}{h} f(x_{i+1})$.

Jelikož je to Lagrangeova interpolace (na jednotlivých intervalech), dostáváme $\max_{x\in[a,b]} |f(x) - S_L(x)| \leq \frac{1}{8} h^2 \max_{x\in[a,b]} |f''(x)|$.

Definice 12.8 (Kubické interpolační spliny)

Hledáme S: $S \in C^2[a,b]$, $S|_{I_i}$ je kubická funkce, $S(x_i) = f(x_i)$. Doplněním 2 podmínek dostaneme jednoznačnost. Většinou se volí $s'(a) = f'(a)$ a $s'(b) = f'(b)$. Nebo $s''(a) = f''(a)$ a $s''(b) = f''(b)$. Nebo tzv. přirozený kubický spline: $s''(a) = s''(b) = 0$.

Definice 12.9 (Momenty splinu)

$M_i = S''(x_i)$.

Lemma 12.3 (Soustava lineárních rovnic pro M_i)

Pro $i \in [n-1]$ platí

$$M_{i-1} + 4M_i + M_{i+1} = \frac{6}{h^2}(f(x_{i+1}) - 2f(x_i) + f(x_{i-1})).$$

Důkaz

Taylor pro S: $S(x_{i+1}) = S(x_i) + S'(x_i)h + S''(x_i)\frac{h^2}{2} + S'''(x,+)\frac{h^3}{6}$. Obdobně $S(x_{i-1}) = S(x_i) - S'(x_i)h + S''(x_i)\frac{h^2}{2} - S'''(x_i,-)\frac{h^3}{6}$. Součtem

$$f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}) = 2f(x_i) + M_i h^2 + (S'''(x_i,+) - S'''(x_i,-))\frac{h^3}{6}.$$

Sečteme-li Taylory pro S'' dostaneme (a to už dopočítáme)

$$f(x_{i+1}) + f(x_{i-1}) = 2f(x_i) + M_i h^2 + (\frac{M_{i+1} - 2M_i + M_{i-1}}{h})\frac{h^3}{6}.$$

□

Poznámka

Je to tedy $A \cdot \mathbf{M} = \frac{6}{h^2}\mathbf{g}$, kde $g_i = f(x_{i+1}) - 2f_i + f_{i-1}$, resp. od g_1 a g_{n-1} jsou odečtené druhé derivace f v daných bodech. Matice A je ostře diagonálně dominantní, tedy regulární a $\exists! S$.

Poznámka (Konstrukce S)

$S(x_i) = f(x_i)$, $S(x_{i+1}) = f(x_{i+1})$, $S''(x_i) = M_i$, $S''(x_{i+1}) = M_{i+1}$.

$$S(x) = \frac{(x-x_i)^3}{6h}M_{i+1} + \frac{(x_{i+1}-x)^3}{6h}M_i + \left(\frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} - \frac{h}{6}(M_{i+1} - M_i)\right)(x - x_i) + f(x_i) - \frac{h^2}{6}M_i.$$

Věta 12.4

Nechť $f \in C^4[a,b]$. Pak $\exists C_0, C_1, C_2$ nezávislá na f a $\{x_i\}_{i=0}^n$:

$$\max_{x\in[a,b]} |f^{(j)}(x) - S^{(j)}(x)| \leq C_j \max_{x\in[a,b]} |f^{(4)}(x)| \cdot h^{4-j}.$$

13 Numerická kvadratura = integrace

Definice 13.1 (Obdélníkové pravidlo)

Chceme integrál $I(f)$ aproximovat $Q(f) := \sum_{i=0}^u w_i f(x_i)$. Například

$$I(f) \approx (b-a)f(\frac{a+b}{2}) =: Q_0(f),$$

což se nazývá obdélníkové pravidlo (midpoint rule).

Definice 13.2 (Newton-Cotes, lichoběžníkové pravidlo, Simpsonovo pravidlo)

$f \approx L_n$, $Q(f) := \int_a^b L_n(x)dx$.

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) l_i(x), \qquad l_i(x) = \prod_{k\neq i} \frac{x - x_k}{x_i - x_k},$$

$$\int_a^b f(x) \approx \int_a^b L_n(x)dx = \sum_i f(x_i) \int_a^b l_i(x)dx = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i) =: Q(f).$$

Poznámka
Takto definované w nezávisí na f.

Metoda Newton-Cotes je tato metoda pro rovnoměrné rozložení uzlů. Pro $n = 1$ je to tzv. Lichoběžníkové pravidlo. Pro $n = 2$ je to Simpsonovo pravidlo (Simpsons' rules), což zintegruje správně i polynom třetího stupně (jelikož x^3 je liché). Pro $n = 3$ se nazývá Simpsonovo 3/8-pravidlo, které je přesné pro polynomy 3. stupně, ale pro 4. stupně ne (jelikož x^4 je sudé). $n = 4$ je Booleovo pravidlo, které je přesné pro polynomy 5. stupně.

Definice 13.3

$Q(f)$ má (algebraický) řád $N \in \mathbb{N}_0$, pokud $Q(p) = I(p)\ \forall p \in P_N$. (Polynomy stupně nejvýše N).

Věta 13.1

Newton-Cotes s uzly rozmístěnými rovnoměrně má řád n, pokud n je liché, a $n + 1$, pokud je sudé.

Důkaz

$$\int_a^b \left(x - \frac{a+b}{2}\right)^{n+1} dx = 0 = Q(f),$$

jelikož aproximace je zřejmě symetrická podle osy $x = \frac{a+b}{2}$.

Ostatní polynomy jdou „šoupnout“ na tento. □

Věta 13.2 (Odhad chyby)

Q … NC kvadratura s obecnými uzly $x_0, \ldots, x_n$. Nechť $f \in C^{n+1}[a,b]$. Pak $|I(f) - Q(f)| \leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{x\in[a,b]} |f^{(n+1)}(x)| \int_a^b |\prod_{i=0}^n (x - x_i)| dx$.

Důkaz

$$|I(f)-Q(f)| = |I(f)-I(L-n)| = |\int_a^b f(x)-L_n(x)|dx \leq \int_a^b \frac{1}{(n+1)!}|f^{(n+1)}(\xi_x)||\prod_{i=0}^n (x-x_i)|dx \leq \ldots$$

□

Definice 13.4 (Gaussova kvadratura)

Chceme najít $\{x_i\}$ a $\{w_i\}$ tak, aby $Q(t) = \sum_{i=0}^n w_i f(x_i)$ měla co nejvyšší řád (nejvýše $2n + 1$, jelikož máme $2(n+1)$ neznámých). Pro jednoduchost na $[-1,1]$.

Pro $n = 1$ vyjde (chceme, aby bylo přesné pro $f = 1, x, x^2, x^3$) $Q(t) = f(-\frac{\sqrt{3}}{3}) + f(\frac{\sqrt{3}}{3})$.

Věta 13.3

Nechť $\{x_i\}_{i=0}^n$ jsou kořeny Legendrova polynomu $\mathcal{L}_{n+1}$. Pak příslušná Q je řádu $2n+1$.

Důkaz

Nechť $p \in P_{2n+1}$, chceme $Q(p) = I(p)$. Vydělíme $p/\mathcal{L}_{n+1}$ se zbytkem: $p(x) = \mathcal{L}_{n+1}(x)p_n(x) + r_n(x)$.

$$I(p) = \int_{-1}^1 p(x)dx = \int_{-1}^1 \mathcal{L}_{n+1}p_n dx + \int_{-1}^1 r_n dx = \int_{-1}^1 r_n dx = Q(r_n) = \sum_{i=0}^n w_i r_n(x_i) = \sum_{i=0}^n w_i p(x_i) = Q($$

□

Poznámka

Neexistuje způsob jak dostat přesně uzly G. kvadratury, existují jen aproximace.

Věta 13.4 (Odhad chyby G. kvadratury na obecném intervalu)

$f \in C^{2n+2}[a,b]$. *Pak Gaussova kvadratura splňuje*

$$|I(f) - Q(f)| \leq \frac{1}{(2n+2)!}(b-a)^{2n+3} \max_{x\in[a,b]} |f^{(2n+2)}(x)|.$$

Důkaz
K uzlům přidáme libovolné další $x_{n+1}, \ldots, x_{2n+1}$. L_n Lagrangeova interpolace na $x_0, \ldots, x_n$ a L_{2n+1} Lagrangeova interpolace na $x_0, \ldots, x_{2n+1}$. Pak $Q(f) := \int_a^b L_n dx = \int_a^b L_{2n+1} dx$, neboť: $L_n(x_i) = L_{2n+1}(x_i) = f(x_i)$. Tedy $L_n - L_{2n+1}$ má kořeny $x_0, \ldots, x_n$.

Tedy $L_n(x) - L_{2n+1}(x) = (x-x_0)\ldots(x-x_n)p_n(x) = \mathcal{L}_{n+1}(x)p_n(x)$, tudíž $\int_a^b L_n - L_{2n+1} dx = 0$. □

Poznámka (Složené kvadratické vzorce)
Interpolace nemusí fungovat pro $n \to \infty$. Takže se používá např. složené lichoběžníkové pravidlo, kdy se l. pravidlo aplikuje na každý interval dělení. Stejně tak složené Simpsonovo pravidlo, kde například uděláme dělení s krokem $2h$ a pak v těchto intervalech přidáme chtěný 3. bod.

Věta 13.5 (Chyba složeného lichoběžníkového pravidla)

TODO

Důkaz
TODO (odhadne se normálním lichoběžníkovým a $\sum_{i=1}^m h = a - b$). □

Definice 13.5 (Metoda polovičního kroku)

Doteď jsme dělali apriori odhad chyby (před výpočtem). To má nevýhodu, že nemusíme znát konstanty a derivace v odhadech.

Nyní aposteriorní odhad chyby (počítán z vypočteného výsledku). Q_h složená kvadraturní formule s krokem h. Nechť platí $I(f) - Q_k(f) \approx Ch^N$. Spočítáme $Q_{\frac{h}{2}} \approx C(\frac{h}{2})^N$. Odečteme $Q_{\frac{h}{2}}(f) - Q_h(f) \approx Ch^n(1 - 2^{-N}) = C(\frac{h}{2})^N(2^n - 1)$. Tedy

$$I(f) - Q_{\frac{h}{2}}(f) \approx \frac{Q_{\frac{h}{2}(f) - Q_h(f)}}{2^N - 1}.$$

Není to odhad, ale spíš indikátor.

14 Numerické řešení ODR

Poznámka (Diskretizace)
Zavedeme si dělení $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b$. Pro jednoduchost nechť je rovnoměrné, tedy $x_n = a + nh$, h je krok metody.

Budeme aproximovat správně řešení $y(x_n)$ hodnotou $y_n \in \mathbb{R}$.

Definice 14.1 (Eulerova metoda)

$$y(x_{n+1}) = y(x_n + h) \approx y(x_n) + y'(x_n) \cdot h = y(x_n) + f(x_n, y(x_n)).$$

y_0 je počáteční podmínka, která je dána.

Definice 14.2 (Explicitní metoda)

Explicitní metoda je metoda, kdy máme explicitní vzorec pro y_{n+1}. Implicitní Eulerova metoda by byla $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$. Zde je třeba vyřešit nějaký nelineární problém.

Tento problém odpovídá $\frac{y_{n+1}-y_n}{h} = f(x_n, y_n)$, čemuž budeme říkat metoda 1. řádu (zanedbaný člen je $O(h)$).

Definice 14.3 (Heunova metoda (modifikovaná Eulerova metoda))

$y' = f(x, y)$ odpovídá $y(x_{n+1} - y(x_n)) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} f(x, y(x))dx$, což je hrozná aproximace integrálu. Zkusme použít lichoběžníkové pravidlo:

$$y_{n+1} - y_n = \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1})) \approx \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_n, y_n + hf(x_{n+1}, y_n))).$$

Poznámka
Heunova metoda je metoda 2. řádu.

Definice 14.4 (Jednobodové metody (JKM))

Jednobodová metoda je metoda, kde počítáme y_{n+1} pouze z y_n. Tedy $y_{n+1} = y_n + h\varphi(x_n, y_n, h)$, kde Φ je tzv. přírůstková funkce.

Například
Euler: $\Phi(x, y, h) = f(x, y)$.

Heun: $\Phi(x, y, h) = \frac{1}{2}\left[f(x, y) + f(x + h, y + h \cdot f(x, y))\right]$.

O Φ předpokládáme, (že souvisí s f) že je spojité, že je lipschitzovské vzhledem k y (jako f).

Definice 14.5

Metoda je konzistentní, pokud $\Phi(x, y, 0) = f(x, y)$.