

Numerikus módszerek I

Gyakorlat jegyzet

Készült Bozsik József előadásai és gyakorlatai alapján

Sárközi Gergő, 2021-22-2. félév
Nincsen lektorálva!

Tartalomjegyzék

1. Gépi számábrázolás, hibaszámítás	4
1.1. Gépi számok, lebegőpontos számábrázolás egy modellje	4
1.2. Valós számok ábrázolása gépi számmal	4
1.2.1. Hibakorlátok	4
1.2.2. Input függvény a gyakorlatban	5
1.3. Gépi számok összeadása	5
1.4. Hibaszámítás elemei	6
1.4.1. Hibák jellemzése	6
1.4.2. Alapműveletek hibakorlátai	6
1.4.3. Függvényérték hibája, kondíciószáma	6
2. Mátrixokról általánosságban	7
2.1. Pozitív definit mátrix definíció	7
2.2. Ortogonális mátrix, ortonormált rendszer	7
2.3. Sajátérték számolás	7
2.4. Determináns számolás	8
2.5. Invertálás	8
3. Gauss-elimináció (GE)	9
3.1. Főelemkiválasztás	9
4. LU felbontás ($A = LU$, ahol $L \in \mathcal{L}_1$ és $U \in \mathcal{U}$)	10
4.1. Gauss-eliminációval (GE-vel)	10
4.2. Létezés (ami \neq LER megoldhatóság)	10
4.3. LU mátrixok közvetlen kiszámolása (GE nélkül)	10
5. LDU felbontás ($L \in \mathcal{L}_1$, $U \in \mathcal{U}_1$, D diagonális)	11
5.1. Szimmetrikus A mátrix, LDL^T felbontás	11

6. Cholesky (LL^T) felbontás ($L \in \mathcal{L}$)	11
7. QR felbontás, Gram-Schmidt féle ortogonalizáció	12
7.1. Gram-Schmidt féle ortogonalizáció, folyamatos normálás . . .	12
7.2. Gram-Schmidt féle ortogonalizáció, normálás utólag	12
8. Householder transzformáció	13
8.1. Egy a vektor $b = k * e_1$ alakúra hozása	13
8.2. LER megoldás Householder transzformációval	13
8.3. QR felbontás Householder transzformációkkal	13
9. Mátrixnormák, vektornormák, kondíciós szám	14
9.1. Vektornormák	14
9.1.1. Axiómák	14
9.1.2. Tudnivalók	14
9.1.3. Gyakori vektornormák	14
9.2. Mátrixnormák	15
9.2.1. Axiómák	15
9.2.2. Tudnivalók	15
9.2.3. Gyakori mátrixnormák	15
9.3. Mátrixok kondíciós száma	16
9.3.1. Tulajdonságok	16
9.3.2. Speciális esetek	16
9.4. Reziduumvektor, maradékvektor	16
10. Iterációs módszerekről általánosságban	17
10.1. Kontrakció	17
10.2. Hibabecslés	17
11. Jacobi-iteráció	18
12. Gauss-Seidel-iteráció	19
13. Richardson-iteráció	20
13.1. Konvergencia	20
14. Részleges LU-felbontás, ILU-iteráció	21
14.1. ILU-felbontás	21
14.2. ILU-iteráció	21
15. Kerekítési hibák hatása az iterációkra	22

16.Maradék tananyag	22
17.ZH2 összefoglalás	23
17.1. Normák, spektrálsugár, kondíciós szám	23
17.1.1. Tulajdonságok, egyebek	23
17.1.2. Vektor- és mátrixnormák axiómái	23
17.1.3. Kondíciós szám	23
17.2. Iterációkról általánosságban	24
17.3. Jacobi-iteráció	24
17.4. Gauss-Seidel-iteráció	24
17.5. Richardson-iteráció	24
17.6. ILU felbontás, ILU-iteráció	25
17.6.1. ILU-felbontás	25
17.6.2. ILU-iteráció	25

1. Gépi számábrázolás, hibaszámítás

1.1. Gépi számok, lebegőpontos számábrázolás egy modellje

- Normalizált lebegőpontos szám: $a = \pm m * 2^k = \pm [m_1 \dots m_t | k]$
 - m : mantissza, hossza t , $m = \sum_{i=1}^t m_i * 2^{-i}$ ($m_1 = 1$; $m_i \in \{0, 1\}$)
 - k : karakterisztika, $k^- \leq k \leq k^+$
- Gép számok halmaza: $M = M(t, k^-, k^+)$ ($k^-, k^+ \in \mathbb{Z}$ és $t \in \mathbb{N}$)
 - $M(t, k^-, k^+) = \{\pm 2^k * \sum_{i=1}^t m_i * 2^{-i}\} \cup \{0\}$
 - Gyakran hozzávesszük: $+\infty, -\infty, NaN$
- Gép számok halmazának tulajdonságai:
 - $\frac{1}{2} \leq m < 1$ és M szimmetrikus 0-ra
 - ϵ_0 : legkisebb pozitív elem: $\epsilon_0 = [100 \dots 0 | k^-] = \frac{1}{2} * 2^{k^-} = 2^{k^- - 1}$
 - M_∞ : legnagyobb elem: $M_\infty = [111 \dots 1 | k^+] = (1 - 2^{-t}) * 2^{k^+}$
 - M -ben az 1 után következő gépi szám és az 1 különbsége:
 $\epsilon_1 = [100 \dots 01 | 1] - [100 \dots 00 | 1] = 2^{-t} * 2^1 = 2^{1-t}$
 - $|M|$: M számossága: $|M| = 2 * 2^{t-1} * (k^+ - k^- + 1) + 1$

1.2. Valós számok ábrázolása gépi számmal

- Ábrázolható számok tartománya: $\mathbb{R}_M = \{x \in \mathbb{R} : |x| \leq M_\infty\}$
- Input függvény, $fl : \mathbb{R}_M \rightarrow M$: x -hez \tilde{x} -et rendel
 - \tilde{x} az x -hez legközelebbi gépi szám, kerekítés szabályai szerint
 - $fl(x) = \begin{cases} 0 & \text{ha } |x| < \epsilon_0 \\ \tilde{x} & \text{ha } \epsilon_0 \leq |x| \leq M_\infty \\ +\infty & \text{ha } |x| > M_\infty \end{cases}$

1.2.1. Hibakorlátok

- Input hiba: $\forall x \in \mathbb{R}_M : |x - fl(x)| \leq \begin{cases} \epsilon_0 & \text{ha } |x| < \epsilon_0 \\ 0.5 * |x| * \epsilon_1 & \text{ha } \epsilon_0 \leq |x| \leq M_\infty \end{cases}$
- Abszolút hibakorlát: $\Delta_x = 0.5 * 2^k * 2^{-t}$
- Relatív hibakorlát: $\delta_x = 2^{-t}$

1.2.2. Input függvény a gyakorlatban

- Feladat: $M(5, -4, 4)$ -ben $fl(10, 85) = ?$
- Első lépés: szám átalakítása 2-es számrendszerbe
 - Táblázatban lehet egyből törtet is átalakítani, pl. $1/6$
 - Kezdő nullákat elhagyjuk, a karakterisztikát annyival eltoljuk

10	5	2	1	0
(: 2)	0	1	0	1
$1010_{(2)}$	\leftarrow	\leftarrow	\leftarrow	\leftarrow

1. táblázat. Egészrész binárisba alakítása

85	70	40	80	60	20	40	80
(*2)	1	1	0	1	1	0	0
$\approx 0.11011_{(2)}$	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow	\rightarrow

2. táblázat. Törtrész binárisba alakítása

- Eredmény: $10, 85 \approx 1010.11011_{(2)} = 1010.1|1011_{(2)}$
- Második lépés: kerekítés
 - Eredmény: $fl(10, 85) = [10110|4] = \frac{22}{32} * 2^4 = 11$
- Harmadik lépés: hibaszámolás: $|10, 85 - fl(10, 85)| = 0, 15$

1.3. Gépi számok összeadása

- Azonos karakterisztikájú számok összeadása: mantissák összeadása, szükség esetén normalizálás (kerekítéssel)
- Eltérő karakterisztikájú számok összeadása: kisebbik karakterisztikát a nagyobbikhoz igazítjuk (kerekítünk, ha kell), majd normál összeadás
- Van rá példa: $b \neq 0 \wedge a \oplus b = a$
 - pl. b karakterisztikája $\leq a$ karakterisztikája + mantissza + 1
 $[10011|4] \oplus [10010|-2] \implies 0.10010_{(2)} * 2^{-2} = 0.00000010010_{(2)} * 2^4$
- Van rá példa: asszociativitás nem teljesül
 - pl. (nagy+kicsi)+kicsi vs nagy+(kicsi+kicsi)
- ZH-ban részletesen le kell vezetni pl. a karakterisztika váltást

1.4. Hibaszámítás elemei

1.4.1. Hibák jellemzése

- Legyen A egy pontos érték, a pedig egy közelítő érték
- $\Delta a = A - a$: közelítő érték pontos hibája
- $|\Delta a| = |A - a|$: közelítő érték abszolút hibája
- $\Delta_a \geq |\Delta a|$: közelítő érték abszolút hibakorlátja
- $\delta a = \frac{\Delta a}{A} \approx \frac{\Delta a}{a}$: közelítő érték relatív hibája
- $\delta_a \geq |\delta a|$: közelítő érték relatív hibakorlátja
- Kerekítés abszolút hibakorlát: 2 tizedesjegyes kerekítés esetén 0.005

1.4.2. Alapműveletek hibakorlátai

- Tétel: alapműveletek hibakorlátai
 - $\Delta_{a \pm b} = \Delta_a + \Delta_b$ $\delta_{a \pm b} = (|a|\delta_a + |b|\delta_b) / |a \pm b|$
 - $\Delta_{a * b} = |b|\Delta_a + |a|\Delta_b$ $\delta_{a * b} = \delta_a + \delta_b$
 - $\Delta_{a/b} = (|b|\Delta_a + |a|\Delta_b) / b^2$ $\delta_{a/b} = \delta_a + \delta_b$
- Két esetben van nagyságrendileg nagyobb hiba, ezeket érdemes elkerülni:
 - $\delta_{a \pm b}$: közeli számok kivonása egymásból
 - $\Delta_{a/b}$: kicsi számmal osztás

1.4.3. Függvényérték hibája, kondíciószáma

- Függvényérték relatív hibája: Ha Δ_a kicsi, akkor $\delta_{f(a)} = \frac{|a||f'(a)|}{|f(a)|} * \delta_a$
- f függvény a -beli kondíciószáma: $c(f, a) = \frac{|a||f'(a)|}{|f(a)|}$

2. Mátrixokról általánosságban

- a_{ij} jelentése: i. sor, j. oszlop az A mátrixban
- \mathcal{U} : felső háromszögmátrixok
- \mathcal{L}_1 : alsó háromszögmátrixok; főátlójukban csupa 1-es van
- A^T jelentése: főátlóra tükrözés
- Szimmetrikus mátrix: $A = A^T$
- Sorokra/oszlopokra szigorúan diagonálisan domináns mátrix: főátlóban lévő elemek abszolútértéke szigorúan nagyobb, mint az adott sorban/oszlopban lévő elemek abszolútértékének összege (átlót nem beleszámítva)

2.1. Pozitív definit mátrix definíció

- Legyen szimmetrikus (TODO ebben a tárgyban ez feltétel vagy sem?)
- Ezek közül legyen egy igaz (ha egy igaz, az akkor az összes is):
 - $\langle Ax, x \rangle = x^T Ax > 0$ bármely $0 \neq x \in \mathbb{R}^n$ esetén
 - minden főminorjának determinánsa pozitív
 - minden sajátértéke pozitív
- Példa pozitív definit mátrixra: diagonális és minden eleme pozitív

2.2. Ortogonális mátrix, ortonormált rendszer

- Ortogonális mátrix: $Q^T = Q^{-1}$
 - Oszlopaik, mint vektorok, ortonormált rendszert alkotnak
 - Ortogonális mátrixok szorzata is ortogonális
- Ortonormált rendszer: $\langle q_i, q_j \rangle = \begin{cases} 0 & \text{ha } i \neq j \\ 1 & \text{ha } i = j \end{cases}$
 - Ortogonális rendszer: $i = j$ esetében lehet bármi, nem csak 1

2.3. Sajátérték számolás

- $|A - \lambda I| = 0$, azaz főátlón mindenhol kivonunk λ -t, kiszámoljuk a paraméteres determinánst és megoldunk egy egyenlőséget ($\det = 0$)

2.4. Determináns számolás

- 1×1 mátrix: a szám maga
- $\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ mátrix: $ad - bc$
- $\begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{bmatrix}$ mátrix: $a * \begin{vmatrix} e & f \\ h & i \end{vmatrix} - b * \begin{vmatrix} d & f \\ g & i \end{vmatrix} + c * \begin{vmatrix} d & e \\ g & h \end{vmatrix}$
 - Lehet sor helyett oszlop szerint is kibontani
- Determináns tartó műveletek:
 - egy sorhoz hozzáadni egy másik sor konstans-szorosát
- Determináns meg kell szorozni $(-1)^n$ -szer: oszlop, sorcserék száma
- Kapcsolat önmagával:
 - $\det(A^T) = \det(A)$
 - $\det(AB) = \det(A) \det(B)$
 - $\det(A^{-1}) = 1/\det(A)$
 - $n \times n$ -es mátrix: $\det(cA) = c^n * \det(A)$
- Háromszög mátrix: determináns a főátlón lévő elemek szorzata
- Főminorok: egy mátrix bal felső almatrójainak a determinánsai
 - D_k a $k \times k$ bal felső részmátrix determinánsa

2.5. Invertálás

- Diagonális mátrix: (főátló) elemeinek reciproka
- $A^{-1} = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^{-1} = \frac{1}{\det(A)} \begin{bmatrix} d & -b \\ -c & a \end{bmatrix}$
- $\begin{bmatrix} a & b & c \\ 0 & d & e \\ 0 & 0 & f \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} 1/a & -b/(ad) & (be - cd)/(afd) \\ 0 & 1/d & -e/(fd) \\ 0 & 0 & 1/f \end{bmatrix}$
 - Alsó háromszögmátrix: ugyan így

3. Gauss-elimináció (GE)

- Alak: $[A|b]$
- Első rész: főátló alatt nullázás, balról jobbra
 - Ezután már egyből lehet determinánst számolni
- Második rész: főátló fölött nullázás, jobbról balra, sor osztása magával
 - Kihagyható: egyenletrendszerrel enélkül is megoldható az $Ax = b$
- Nullázás: a pillanatnyi sor konstans-szorosát hozzáadjuk egy másikhoz
- Inverz számolás: b helyett az identitásmátrix legyen a jobb oldalon.
Ekkor amikor bal oldalon identitásmátrix van: jobb oldalon az inverz.
- Sorcsere: nem változik a megoldás
- Oszlopcsere: a megoldás komponensei cserének megfelelően változnak
- Főátlón 0 van, alatta/felette nem: oszlop/sorcsere kell
- Nincs megoldás: ha bal oldalon 0-k vannak a sorban, jobb oldalon nem
- Függő paraméter: ha egy sorban csak 0-k vannak mindkét oldalt

$$\begin{array}{c}
 \left[\begin{array}{cccc|c} 1 & 0 & 7/5 & 2/5 & 14/5 \\ 0 & 1 & -3/5 & -3/5 & -1/5 \end{array} \right] \\
 \hline
 \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14/5 - 7/5r - 2/5s \\ -1/5 + 3/5r + 3/5s \\ r \\ s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 14/5 \\ -1/5 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + r \cdot \begin{bmatrix} -7/5 \\ 3/5 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} + s \cdot \begin{bmatrix} -2/5 \\ 3/5 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}
 \end{array}$$

3.1. Főelemkiválasztás

- Részleges főelemkiválasztás: adott oszlopban maximális abszolút értékű elem (sor) kiválasztása (ami a főátlón vagy az alatt van), áthelyezése a főátlóra, és a többi sor azzal való eliminálása
- Teljes főelemkiválasztás: részleges főelemkiválasztás, csak bármelyik oszlopból választunk (de mindig csak a jobb alsó részmátrixból)

4. LU felbontás ($A = LU$, ahol $L \in \mathcal{L}_1$ és $U \in \mathcal{U}$)

- Felhasználás: $Ax = b$ helyett $Ly = b$ (alsó Δ) és $Ux = y$ (felső Δ)

4.1. Gauss-eliminációval (GE-vel)

- $L_{n-1} * \dots * L_2 * L_1 * A = U \implies A = L_1^{-1} * L_2^{-1} * \dots * L_{n-1}^{-1} * U = LU$
- Minden GE lépés egy $L_i \in \mathcal{L}_1$, elemei: hányzorost adtunk a sorhoz
- L_i invertálásakor az elemek előjelet cserélnek, ekkor elemek: $\frac{\text{adott sorbeli érték}}{\text{elimináló sor értéke}}$
- Tömör írásmód: nem hozunk létre L_i mátrixokat, hanem a GE-ben használt mátrix alsó részét vastag vonallal leválasztjuk és oda írjuk be a végső L értékeit, folyamatosan, ahogy kiszámoljuk őket

4.2. Létezés (ami \neq LER megoldhatóság)

- GE végrehajtható sor- és oszlopcsere nélkül \implies létezik LU felbontás
- D_k főminorok $\neq 0 \implies$ létezik LU felbontás (és $u_{kk} \neq 0$)
- $\det(A) \neq 0 \implies$ az LU felbontás egyértelmű

4.3. LU mátrixok közvetlen kiszámolása (GE nélkül)

- Írjuk fel az L, U mátrixokat változókkal (minden elem 0 vagy egy változó)
 - Segítség: U és A első sora megegyezik
 - Segítség: A első oszlopa leosztva a_{11} -gyel egyezik L első oszlopával
- Egy jó sorrendben (lásd kép) számoljuk ki a változókat: mátrixszorzás eredményét tudjuk, vissza kell fejtenünk a változókat
 - Ellentmondás \implies az LU felbontás nem létezik

$$\begin{pmatrix} 1. & 1. & 1. & 1. \\ 2. & 3. & 3. & 3. \\ 4. & 4. & 5. & 5. \\ 6. & 6. & 6. & 7. \end{pmatrix}$$

sorfolytonosan

$$\begin{pmatrix} 1. & 3. & 5. & 7. \\ 2. & 3. & 5. & 7. \\ 2. & 4. & 5. & 7. \\ 2. & 4. & 6. & 7. \end{pmatrix}$$

oszlopfolytonosan

$$\begin{pmatrix} 1. & 1. & 1. & 1. \\ 2. & 3. & 3. & 3. \\ 2. & 4. & 5. & 5. \\ 2. & 4. & 6. & 7. \end{pmatrix}$$

parkettaszerűen

5. LDU felbontás ($L \in \mathcal{L}_1$, $U \in \mathcal{U}_1$, D diagonális)

- Előállítás LU felbontásból: $A = L\tilde{U} = LD * (D^{-1}\tilde{U}) = LDU$
 - \tilde{U} főátlóját átmásoljuk D -be, helyére 1-esek kerülnek
 - \tilde{U} minden többi elemét leosztjuk \tilde{U} azonos sorának főátlóbeli elemével
 - Így megkaptuk az U mátrixot, L mátrixot pedig békén hagyjuk

5.1. Szimmetrikus A mátrix, LDL^T felbontás

- Szimmetrikus az A mátrix $\implies LDU = LDL^T$
- GE-vel elég csak a főátlót (D) és az alsó részt (L) tárolni

6. Cholesky (LL^T) felbontás ($L \in \mathcal{L}$)

- Felhasználás: $Ax = b$ helyett $Ly = b$ (alsó Δ) és $L^Tx = y$ (felső Δ)
- A szimmetrikus és A pozitív definit \implies létezik és egyértelmű
- Előállítás LDU felbontásból: $A = \tilde{L}D\tilde{L}^T = \tilde{L}\sqrt{D}\sqrt{D}\tilde{L}^T = LL^T$
 D minden eleméből gyököt vonunk, ezzel megszorozzuk \tilde{L} -t:
 $L = \tilde{L} * \sqrt{D}$ és $L^T = \sqrt{D} * \tilde{L}^T$ (L : oszlop; L^T : sor szorzás D elemével)
- Előállítás GE-vel: minden lépésben osztjuk az oszlopot $\sqrt{a_{kk}}$ -val

7. QR felbontás, Gram-Schmidt féle ortogonalizáció

- Q ortogonális mátrix, $R \in \mathcal{U}$
- Felhasználás: $Qy = b \implies y = Q^T b$ és $Rx = y$ (felső Δ)
 - Egybe írva: $Rx = Q^T b$
- $\det(A) \neq 0 \implies$ létezik QR felbontás
 - $\forall r_{ii} > 0 \implies$ egyértelmű a QR felbontás

7.1. Gram-Schmidt féle ortogonalizáció, folyamatos normálás

- a_i jelentése: A mátrix i . oszlopa
- $r_{11} = \|a_1\|$ és $q_1 = \frac{1}{r_{11}}a_1$
- k : hányadik lépés van most ($k = 2, \dots, n$); valamint: $j = 1, \dots, k-1$
- $r_{jk} = \langle a_k, q_j \rangle$ és $s_k = a_k - \sum_{j=1}^{k-1} r_{jk} * q_j$ és $r_{kk} = \|s_k\|$ és $q_k = \frac{1}{r_{kk}}s_k$

7.2. Gram-Schmidt féle ortogonalizáció, normálás utólag

- $\tilde{r}_{11} = \tilde{r}_{kk} = 1$ és $\tilde{q}_1 = a_1$
- $\tilde{r}_{jk} = \langle a_k, \tilde{q}_j \rangle / \langle \tilde{q}_j, \tilde{q}_j \rangle$ és $\tilde{q}_k = a_k - \sum_{j=1}^{k-1} \tilde{r}_{jk} * \tilde{q}_j$
- Ilyenkor már $A = \tilde{Q}\tilde{R}$, de \tilde{Q} nem ortonormált
- \tilde{Q} elkészítése: \tilde{Q} oszlopait (\tilde{q}_i) le kell osztani $\|\tilde{q}_i\|$ -vel
- \tilde{R} elkészítése: \tilde{R} sorait meg kell szorozni $\|\tilde{q}_i\|$ -vel
(A legfelső sort a leg bal oldalibb oszloppal kell szorozni.)

8. Householder transzformáció

- Householder mátrix: $H(v) = I - 2vv^T$ ahol $\|v\| = 1$
 - $H(v)$ tükröző mátrix, v normálvektorú, $n - 1$ dim. altérre tükröz
 - Szimmetrikus ($H^T = H$), ortogonális ($H^{-1} = H$ és $\|x\| = \|H(v)x\|$)
 - $H(v) * v = -v$ és $\forall y \perp v : H(v) * y = y$
 - Nem kell előállítani, a Householder transzformáció anélkül is alkalmazható:
 $H(v)x = (I - 2vv^T)x = x - 2v(v^Tx)$ ahol $v^Tx \in \mathbb{R}$ és $x \in \mathbb{R}^n$
 $y^TH(v) = y^T(I - 2vv^T) = y^T - 2(y^Tv)v^T$ ahol $y^Tv \in \mathbb{R}$ és $y \in \mathbb{R}^n$
- Tükrözés: $v = \pm \frac{a-b}{\|a-b\|}$, $a \neq b$, $\|a\| = \|b\| \neq 0$ esetén: $H(v)a = b$

8.1. Egy a vektor $b = k * e_1$ alakúra hozása

- $k = -1 * \text{signum}(a_1) * \|a\|$ és $v = \frac{a - ke_1}{\|a - ke_1\|}$
- Ekkor: $H(v) * a = a - 2v(v^Ta) = a - 2(v^Ta)v = ke_1$ ($2(v^Ta) \in \mathbb{R}$)

8.2. LER megoldás Householder transzformációval

- Cél: felső háromszög alakra hozás
- Minden lépésben egy oszlopot $k * e_1$ alakúra hozunk
- A transzformációt a többi oszlopon és b -n is elvégezzük:
 $c := c - 2(v^Tc)v$ ahol c egy tetszőleges oszlop (vagy b)
 - Ha c az az oszlop, amivel létrehoztuk v -t: az eredmény $k * e_1$
- Következő lépésben eggyel kisebb mátrixon folytatjuk

8.3. QR felbontás Householder transzformációkkal

- TODO nem sikerült felfognom/megértenem, de minta ZH-ban sem volt

9. Mátrixnormák, vektornormák, kondíciós szám

9.1. Vektornormák

9.1.1. Axiómák

- Az alábbi tulajdonságok mindegyikével bíró függvények a vektornormák
- $\|x\| \geq 0$
- $\|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
- $\|\lambda * x\| = |\lambda| * \|x\|$
- $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

9.1.2. Tudnivalók

- $\|x\|_\infty \leq \|x\|_2 \leq \|x\|_1$ de $\exists c_1, c_2 : c_1 * \|x\|_b \leq \|x\|_a \leq c_2 * \|x\|_b$
 - Azaz ekvivalensek a normák

9.1.3. Gyakori vektornormák

- Manhattan norma: $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$
- Euklideszi norma: $\|x\|_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle} = \sqrt{x^T x} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$
- Csebisev norma: $\|x\|_\infty = \max |x_i|$
- p-norma: $\|x\|_p = (\sum_{i=1}^n |x_i|^p)^{1/p} \quad (1 \leq p < \infty)$

9.2. Mátrixnormák

9.2.1. Axiómák

- Vektorok axiómái
- És egy extra: $\|A * B\| \leq \|A\| * \|B\|$

9.2.2. Tudnivalók

- Indukált norma, természetes mátrixnorma: $\|A\| = \sup \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \quad (x \neq 0)$
- Illeszkedő norma: $\|Ax\|_v \leq \|A\| * \|x\|_v$
- Természetes mátrixnormák illeszkednek az őket indukáló vektornormákhoz

9.2.3. Gyakori mátrixnormák

- Frobenius-norma (nem indukált): $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}$
 - Illeszkedik a kettes vektornormához
- Oszlopnorma: $\|A\|_1 = \max_{j=1}^n \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$ (oszlop szummák maximuma)
- Sornorma: $\|A\|_\infty = \max_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ (sor szummák maximuma)
 - Szimmetrikus mátrix esetén megegyezik az oszlopnormával
- Spektrálnorma: $\|A\|_2 = \sqrt{\max_{i=1}^n \lambda_i(A^T A)} = \sqrt{\varrho(A^T A)}$
 - $\lambda_i(A^T A)$ az $A^T A$ mátrix különböző sajátértékeit jelenti
 - Spektrálsugár: $\varrho(A) = \max_{i=1}^n |\lambda_i(A)|$
 - Szimmetrikus mátrix esetén: $\|A\|_2 = \varrho(A)$

9.3. Mátrixok kondíciósza

- $\kappa(A) = \text{cond}(A) = \|A\| * \|A^{-1}\|$
- Csak invertálható mátrixokra értelmes
- Értéke függ a választott normától
- Jellemzi LER feladat érzékenységét a (bemeneti, számábrázolási) hibára
 - Minél nagyobb a kondíciósza, annál rosszabb

9.3.1. Tulajdonságok

- Indukált norma esetén: $\text{cond}(A) \geq 1$
- $c \neq 0 \implies \text{cond}(c * A) = \text{cond}(A)$

9.3.2. Speciális esetek

- Ha Q ortogonális: $\text{cond}_2(Q) = 1$
- Ha A szimmetrikus: $\text{cond}_2(A) = \frac{\max |\lambda_i(A)|}{\min |\lambda_i(A)|}$
- Ha A invertálható: $\text{cond}(A) \geq \frac{\max |\lambda_i(A)|}{\min |\lambda_i(A)|}$

9.4. Reziduumvektor, maradékvektor

- Legyen \tilde{x} az $Ax = b$ LER egy közelítő megoldása
- Ekkor $r = b - A\tilde{x}$ a reziduum- vagy maradékvektor
- Jellemzi megoldó módszer érzékenységét (bemeneti/számábrázolási) hibára
 - Kondíciósza a feladat érzékenységét jellemzi, ez a megoldás módszerét
- Relatív maradék: $\eta = \frac{\|r\|}{\|A\| * \|\tilde{x}\|}$
 - Ha A invertálható, akkor illeszkedő normában: $\eta \leq \frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$
 - Egyenlőség áll fenn kettes norma esetén

10. Iterációs módszerekről általánosságban

- $\varphi(x) = Bx + c$
 - B : átmenet mátrix
 - $x^{(0)}$ tetszőleges, $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)})$
- Vektorsorozat akkor konvergens, ha
 $\exists x^* \in \mathbb{R}^n : \forall \epsilon > 0 : \exists N \in \mathbb{N} : \forall k > N : \|x^{(k)} - x^*\| < \epsilon$
- Iteráció és LER: $x^* = Bx^* + c \Leftrightarrow (I - B)x^* = c \Leftrightarrow Ax = b$
- Fixponttétel: x^* az φ leképezés fixpontja, ha $x^* = \varphi(x^*)$

10.1. Kontrakció

- φ kontrakció, ha $\exists q \in [0, 1) : \|\varphi(x) - \varphi(y)\| \leq q * \|x - y\| \quad (\forall x, y \in \mathbb{R}^n)$
- q neve: kontrakciós együttható (minél kisebb, annál gyorsabb a kontrakció)
- Kontrakció esetén létezik egyértelmű fixpont
- Nézzük a $\varphi(x) = Bx + c$ leképezést (ekkor $q = \|B\|$, azonos normában)
 - Elégséges feltétel kontrakcióra bármilyen kezdőértékkel: $\|B\| < 1$
 - Szükséges és elégséges feltétel, bármilyen kezdőérték: $\rho(B) < 1$
 - Ha a fenti állítások igazak, akkor $\forall x^{(0)}$ esetén kontrakció
 - Ha nem igazak, akkor is létezhet $x^{(0)}$, amire kontrakció

10.2. Hibabecslés

- Ugyan azt a normát használjuk, mint a kontrakciós együtthatóhoz
- $\|x^{(k)} - x^*\| \leq q^k * \|x^{(0)} - x^*\|$
- $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} * \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$
- Hány (k) lépést kell tenni adott (α) pontossághoz adott x_0 esetén?
 - $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} * \|x^{(1)} - x^{(0)}\| \leq \alpha \quad (\text{itt } q, x^{(1)}, x^{(0)}, \alpha \text{ ismert})$
 - Rendezve: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq q^k \leq \dots * \alpha \implies k \geq \log_q(\dots * \alpha)$
 - * Reláció megfordult, mert $q < 1$

11. Jacobi-iteráció

- Eredeti feladat: $Ax = b$
- Legyen $A = L + D + U$ (semmi köze az LDU-felbontáshoz)
- Iteráció: $x^{(k+1)} = -D^{-1}(L + U)x^{(k)} + D^{-1}b = B_J * x^{(k)} + c_J$
- Koordinátás, komponensenkénti alak
 - $x_i^{(k+1)} = \frac{-1}{a_{ii}}(\sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij}x_j^{(k)} - b_i)$
 - pl. $x_2^{(1)} = \frac{-1}{a_{22}}(a_{21}x_1^{(0)} + a_{23}x_3^{(0)} - b_2)$
- Reziduum vektoros alak
 - $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ és $k = 1, \dots$
 - $s^{(k)} = D^{-1}r^{(k)}$
 - $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$ és $r^{(k+1)} = r^{(k)} - As^{(k)}$
- Ha A szig. diag. dom. a soraira, akkor az iteráció mindig konvergens
- Relaxált, csillapított Jacobi-iteráció: nem szokott lenni ZH-ban

12. Gauss-Seidel-iteráció

- Eredeti feladat: $Ax = b$
- Legyen $A = L + D + U$ (semmi köze az LDU-felbontáshoz)
- Iteráció: $x^{(k+1)} = -(L + D)^{-1}Ux^{(k)} + (L + D)^{-1}b = B_S * x^{(k)} + c_S$
- Koordinátás, komponensenkénti alak
 - $x_i^{(k+1)} = \frac{-1}{a_{ii}}(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} - b_i)$
 - pl. $x_2^{(1)} = \frac{-1}{a_{22}}(a_{21}x_1^{(1)} + a_{23}x_3^{(0)} - b_2)$
- Reziduum vektoros alak
 - $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ és $k = 1, \dots$
 - $s^{(k)} = (D + L)^{-1}r^{(k)}$
 - $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$ és $r^{(k+1)} = r^{(k)} - As^{(k)}$
- Az iteráció minden $x^{(0)}$ esetén konvergens, ha
 - ha A szigorúan diagonális domináns a soraira
 - vagy ha A pozitív definit mátrix
- Csillapított, relaxált Gauss-Seidel-iteráció: nem szokott lenni ZH-ban

13. Richardson-iteráció

- Legyen A egy pozitív definit mátrix és $p \in \mathbb{R}$
 - Pozitív definit \Leftrightarrow minden sajátértéke pozitív
- Eredeti feladat: $Ax = b \implies p * Ax = p * b$
- Iteráció: $x^{(k+1)} = (I - pA)x^{(k)} + pb = B_{R(p)} * x^{(k)} + c_{R(p)}$
- Reziduum vektoros alak
 - $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ és $k = 1, \dots$
 - $s^{(k)} = pr^{(k)}$
 - $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$ és $r^{(k+1)} = r^{(k)} - As^{(k)}$

13.1. Konvergencia

- Legyenek A sajátértékei $m = \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n = M$
- $R(p)$ pontosan $p \in (0; \frac{2}{M})$ esetén konvergens ($\forall x^{(0)}$)
- Optimális paraméter: $p_0 = \frac{2}{M+m}$
 - Ekkor $q = \frac{M-m}{M+m} = \|B_{R(p_0)}\|_2 = \varrho(B_{R(p_0)})$

14. Részleges LU-felbontás, ILU-iteráció

14.1. ILU-felbontás

- J : (mátrix) pozícióhalmaz, $(i, i) \notin J$
- $(i, j) \in J \implies l_{ij} = u_{ij} = 0$ valamint $(i, j) \notin J \implies a_{ij} = (LU)_{ij}$
 - Azaz rendes $A = LU$ felbontás, de pár elem 0
- Felbontás algoritmus (L , U és Q kiszámolása)
 - $k = 1, \dots, n - 1$ és $\tilde{A}_1 = A$
 - $\tilde{A}_k = P_k - Q_k$
 - * k -adik sor/oszlop van J -ben: Q -ba beletesszük A azon pozíciójának -1 -szeresét és P -ban 0-ra állítjuk az értéket
 - $\tilde{A}_{k+1} = L_k P_k$
 - * GE-vel elimináljuk P k -adik oszlopát, "lépést" L_k^{-1} -be mentjük
 - * Gyakorlatilag LU-felbontás: $\tilde{A}_n \sim U$
 - * Tömör írásmódra is van lehetőség: A , L , P egyben
- Felbontás befejezése (cél: $A = LU - Q$)
 - $U = \tilde{A}_n$
 - $L = L_1^{-1} * \dots * L_{n-1}^{-1}$ (összepakolás)
 - $Q = Q_1 + \dots + Q_{n-1}$ (összepakolás)

14.2. ILU-iteráció

- Eredeti feladat: $Ax = b$
- Legyen $A = P - Q$ és $P = LU$
- Iteráció: $x^{(k+1)} = P^{-1}Qx^{(k)} + P^{-1}b = B_{ILU} * x^{(k)} + c_{ILU}$
- Koordinátás, komponensenkénti alak: nem volt a dián
- Reziduuum vektoros alak
 - $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ és $k = 1, \dots$
 - $s^{(k)} = P^{-1}r^{(k)}$
 - $x^{(k+1)} = x^{(k)} + s^{(k)}$ és $r^{(k+1)} = r^{(k)} - As^{(k)}$

15. Kerekítési hibák hatása az iterációkra

- Legyen ϵ a lépésenkénti hiba felső korlátja: $\|\epsilon^{(k)}\| \leq \epsilon$
- Ekkor $\lim_{k \rightarrow \infty} \|z^{(k)}\| \leq \frac{\epsilon}{1-\|B\|}$

16. Maradék tananyag

- Nemlineáris dolgok és 12. előadás anyaga: rendes ZH-n nem lesz, de javító ZH-n és vizsgán lesz

17. ZH2 összefoglalás

17.1. Normák, spektrálsugár, kondíciós szám

- Manhattan norma: $\|x\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$
- Euklideszi norma: $\|x\|_2 = \sqrt{\langle x, x \rangle} = \sqrt{x^T x} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$
- Csebisev norma: $\|x\|_\infty = \max |x_i|$
- p-norma: $\|x\|_p = (\sum_{i=1}^n |x_i|^p)^{1/p} \quad (1 \leq p < \infty)$
- Frobenius-norma (nem indukált, 2-höz illeszkedő): $\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|^2}$
- Oszlopnorma: $\|A\|_1 = \max_{j=1}^n \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$ (oszlop szummák maximuma)
- Sornorma: $\|A\|_\infty = \max_{i=1}^n \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$ (sor szummák maximuma)
- Spektrálnorma: $\|A\|_2 = \sqrt{\max_{i=1}^n \lambda_i(A^T A)} = \sqrt{\varrho(A^T A)}$
 - Spektrálsugár: $\varrho(A) = \max_{i=1}^n |\lambda_i(A)|$
 - Szimmetrikus mátrix esetén: $\|A\|_2 = \varrho(A)$

17.1.1. Tulajdonságok, egyebek

- Normák ekvivalensek: $\exists c_1, c_2 : c_1 * \|x\|_b \leq \|x\|_a \leq c_2 * \|x\|_b$
- Indukált norma, természetes mátrixnorma: $\|A\| = \sup \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} \quad (x \neq 0)$
- Illeszkedő norma: $\|Ax\|_v \leq \|A\| * \|x\|_v$

17.1.2. Vektor- és mátrixnormák axiómái

- $\|x\| \geq 0$ $\circ \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = 0$
- $\|\lambda * x\| = |\lambda| * \|x\|$ $\circ \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$
- Csak mátrixnormákhoz: $\|A * B\| \leq \|A\| * \|B\|$

17.1.3. Kondíciós szám

- $\kappa(A) = \text{cond}(A) = \|A\| * \|A^{-1}\|$
- A szimmetrikus $\implies \text{cond}_2(A) = \frac{\max |\lambda_i(A)|}{\min |\lambda_i(A)|}$

17.2. Iterációkról általánosságban

- $x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}) = Bx^{(k)} + c$ ahol B az átmenet mátrix és $x^{(0)}$ tetszőleges
- $Ax = b \Leftrightarrow (I - B)x = c \Leftrightarrow x = Bx + c$
- $q \in [0, 1)$ esetén φ kontrakció, \exists fixpont ($x = \varphi(x)$), minden $x^{(0)}$ jó
- Elégséges feltétel: $q = \|B\| < 1$
- Szükséges és elégséges feltétel: $q = \varrho(B) < 1$
- Hibabecslés: $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} * \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$ (illeszkedő normában)

17.3. Jacobi-iteráció

- $A = L + D + U$ (nem LDU-felbontás)
- Vektoros alak: $x^{(k+1)} = -D^{-1}(L + U)x^{(k)} + D^{-1}b = B_J * x^{(k)} + c_J$
- Koordinátás alak: $x_i^{(k+1)} = \frac{-1}{a_{ii}}(\sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij}x_j^{(k)} - b_i)$
- A szig. diag. dom. soraira \implies mindig konvergens

17.4. Gauss-Seidel-iteráció

- $A = L + D + U$ (nem LDU-felbontás)
- Vektoros alak: $x^{(k+1)} = -(L + D)^{-1}Ux^{(k)} + (L + D)^{-1}b = B_S * x^{(k)} + c_S$
- Koordinátás alak: $x_i^{(k+1)} = \frac{-1}{a_{ii}}(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} - b_i)$
- A szig. diag. dom. soraira vagy A poz. definit \implies mindig konvergens

17.5. Richardson-iteráció

- Feltétel: A pozitív definit mátrix: $0 < m = \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_n = M$
- $Ax = b \implies p * Ax = p * b$ ($p \in \mathbb{R}$)
- Vektoros alak: $x^{(k+1)} = (I - pA)x^{(k)} + pb = B_{R(p)} * x^{(k)} + c_{R(p)}$
- $R(p)$ konvergens minden $x^{(0)}$ -ra $\Leftrightarrow p \in (0; \frac{2}{M})$
- Optimális p : $p_0 = \frac{2}{M+m} \implies q = \frac{M-m}{M+m} = \|B_{R(p_0)}\|_2 = \varrho(B_{R(p_0)})$

17.6. ILU felbontás, ILU-iteráció

17.6.1. ILU-felbontás

- J pozícióhalmaz, $(i, i) \notin J$
- $k = 1, \dots, n$
- $A \implies \tilde{A}_1 = A$
- $\tilde{A}_k \implies \tilde{A}_k = P_k - Q_k$ hogy ha J -ben van k -adik oszlop/sor pozíció:
 - Q -ba beletesszük az érték -1 -szeresét
 - P -ben 0-ra állítjuk azon értéket
- GE-vel P k -adik oszlopának eliminációja: $\tilde{A}_{k+1} = L_k P_k$
 - Gyakorlatilag LU-felbontás, tömör írásmódra is van lehetőség
- Felbontás befejezése (cél: $A = LU - Q$)
 - $U = \tilde{A}_n$
 - $L = L_1^{-1} * \dots * L_{n-1}^{-1}$ (összepakolás)
 - $Q = Q_1 + \dots + Q_{n-1}$ (összepakolás)

17.6.2. ILU-iteráció

- $A = P - Q$ és $P = LU$
- Vektoros alak: $x^{(k+1)} = P^{-1}Qx^{(k)} + P^{-1}b = B_{ILU} * x^{(k)} + c_{ILU}$