1 LU rozklad

1.1 Opakování a LU rozklad v MATLABu

LU rozklad je maticový zápis Gaussovy eliminace, tedy převodu matice do odstupňovaného tvaru. Označíme-li E_k matici elementární transformace (vynásobení řádku nenulovým číslem, prohození dvou řádků, nebo přičtení násobku řádku k jinému), pak lze Gaussovu eliminaci schematicky zapsat jako

$$A \to A^{(1)} = E_1 A \to \dots \to U = A^{(n-1)} = \underbrace{E_{n-1} \dots E_1}^{L^{-1}} A,$$
 (1)

kde U je matice v odstupňovaném tvaru a platí LU=A. (Připomínáme, že matice elementárních úprav jsou regulární.)

Pro tzv. silně regulární matice nepotřebujeme v Gaussově eliminaci prohazovat řádky. Pak je matice L dolní trojúhelníková, což vysvětluje název rozkladu (Lower–Upper). To, jestli je matice silně regulární, ale bohužel obvykle dopředu nevíme.

Úloha 1. Pro vestavěnou funkci [L,U] = lu(A):

- Zvolte A = wilkinson(6) a spočítejte její LU rozklad. Ověřte, že U je horní trojúhelníková. Je L dolní trojúhelníková?
- Prohoďte u matice A třetí a čtvrtý sloupec a zopakujte.
- (navíc) nastudujte si v nápovědě variantu volání vestavěné funkce jako [L,U,P] = lu(A). Čemu odpovídá matice P? Jak se změní vlastnosti L oproti [L,U] = lu(A)?

Řešení. V prvním případě L dolní trojúhelníková není.

Pro [L,U] = lu(A(:,[1 2 4 3 5 6])) už L dolní trojúhelníková je.

[L,U,P] = lu(A) odpovídá tomu, že elementární operace prohození řádků jsou uloženy v matici P, matice L je pak vždy dolní trojúhelníková.

1.2 Řídké matice a LU rozklad

V řadě aplikací dostáváme matice, které mají na většině pozic nuly. Těmto maticím říkáme $\check{r}idk\acute{e}$ a obvykle u nich ukládáme pouze nenulové prvky. (Matice, které nejsou řídké, označujeme jako $hust\acute{e}$.)

- **Úloha 2.** Vytvořte řídkou matici příkazem B = gallery('poisson',5); Jaký má rozměr? Jaký je rozdíl zadáte-li do příkazové řádky bez středníku A (z předchozí úlohy), resp. B?
 - Pomocí příkazu whos srovnejte paměťové nároky na uložení řídké matice
 B = gallery('poisson',50); a náhodné (husté) matice stejného řádu.
 - (navíc) Jakou největší matici lze pomocí B = gallery('poisson', N); sestavit a uložit? Odhadněte na základě několika voleb parametru N a ověřte.

 $\check{R}e\check{s}en\acute{i}.$ • U řídkých matic MATLAB vypisuje pozici nenulového prvku a jeho hodnotu; husté matice vypisuje po řádcích.

• Je to necelých 250 kB vs skoro 48 MB.

Úloha 3. Zkonstruujte matici B = gallery('poisson',50); a matici C, která vznikne přidáním sloupcového vektoru samých jedniček (vhodné délky) zleva k matici B. Proveďte pro obě LU rozklad. Pomocí příkazu whos srovnejte paměťové nároky pro matice B a C a pro jejich LU faktory. Pomocí příkazu spy srovnejte zaplnění (tj. počet nenulových prvků) faktorů L pro matice B a C.

```
Rešení. C = [ones(2500,1),B];
[LB,UB] = lu(B);
[LC,UC] = lu(C);
spy(LB);
spy(LC);
```

LC je plná dolní trojúhelníková matice s 3 126 250 nenulovými prvky, LB jich má jen 125 049. I tak je to víc než desetkrát více, než kolik je nenul v matici B!

Úloha 4. (navíc) Zkonstruujte matici B = gallery('poisson',500); a spočítejte její LU rozklad. Jak dlouho to trvá? Kolik paměti faktory L a U zabírají?

2 Stacionární iterační metody

Přímé metody (jako například LU rozklad) pro řešení soustav lineárních rovnic Ax = b s regulární maticí, po nějaké době výpočtu, vydají jedno numerické řešení. Myšlenka iteračních metod je principálně odlišná, spočívá v konstrukci posloupnosti aproximací (přibližných řešení) x_0, x_1, x_2, \ldots , jež by se měla přibližovat skutečnému řešení x. Výhodou iteračních metod je, že (nějakou) aproximaci získáváme v každé iteraci, tj. kdykoli zastavíme výpočet.

2.1 Klasické iterační metody

Klasické iterační metody jsou založeny na štěpení matice soustavy A=M-N, kde matice M je regulární a snadno invertovatelná. Dosazením do vztahu Ax=b postupně dostáváme

$$(M-N)x = b$$

$$Mx = Nx+b$$

$$x = M^{-1}Nx+M^{-1}b.$$

Je-li dána počáteční aproximace řešení x_0 , můžeme definovat iterační proces

$$x_k = M^{-1} N x_{k-1} + M^{-1} b.$$

Pro analýzu stacionárních iteračních metod je důležitý následující vztah mezi chybami dvou následujících přibližných řešení x_{k-1} a x_k :

$$x - x_k = M^{-1}N(x - x_{k-1}) = (I - M^{-1}A)(x - x_{k-1}) = (I - M^{-1}A)^k(x - x_0).$$

2.2 Příklady klasických iteračních metod

Klasické iterační metody jsou založeny na štěpení ve tvaru A=D-L-U, kde D je hlavní diagonála, -L je striktně dolní trojúhelník matice A a -U je striktně horní trojúhelník matice A. Jednotlivé metody pak lze odvodit z rovnice

$$(D - L - U)x = b.$$

• V Jacobiho metodě volíme M=D, N=L+U, a je tedy definována iterací

$$Dx_k = Lx_{k-1} + Ux_{k-1} + b,$$

• Gauss–Seidelova metoda používá M=D-L, N=U a je definována jako

$$Dx_k = Lx_k + Ux_{k-1} + b.$$

2.3 Asymptotická konvergence

Z přednášky víme, že metoda je konvergentní právě tehdy, když $\rho(M^{-1}N) < 1$. Tím myslíme, že pro libovolný počáteční vektor chyba $x - x_k$ konverguje k nulovému vektoru.

Úloha 5. Pro matici

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0.5 & 0.5 \\ 0.5 & 1 & 0.5 \\ 0.5 & 0.5 & 1 \end{bmatrix} \qquad \text{p\'r\'ipadn\'e (nav\'ic)} \quad A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & -3 \end{bmatrix}$$

odvoďte matici $M^{-1}N$ z Jacobiho a Gauss–Seidelovy metody a rozhodněte, zda metody budou konvergentní, nebo ne. Pro výpočty inverzí matice a vlastních čísel můžete využít MATLAB.

Řešení.

$$(M^{-1}N)_{\text{Jacobi}} = -\begin{bmatrix} 0 & 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 0 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 & 0 \end{bmatrix} \qquad \text{sp}((M^{-1}N)_{\text{Jacobi}}) = \{-1, 1/2, 1/2\},$$

takže Jacobiho metoda konvergentní není, zatímco Gauss-Seidel ano, protože

$$(M^{-1}N)_{GS} = \begin{bmatrix} 0 & -1/2 & -1/2 \\ 0 & 1/4 & -1/4 \\ 0 & 1/8 & 3/8 \end{bmatrix}$$
 sp((M⁻¹N)_{GS}) = {0, 1/16 · (5 ± i√7)}.

2.4 Přechodový jev

Zatímco vlastnost $\rho(M^{-1}N) < 1$ zaručuje, že chyba $x - x_k$ konverguje k nulovému vektoru, což také zaručuje $\|x - x_k\|_* \to^{k \to \infty} 0$ pro libovolnou vektorovou normu, pro popis $\|x - x_k\|_*$ v úvodních iteracích (pro malé k) nemusí být $\rho(M^{-1}N)$ vypovídající.

Situaci, kdy chyba $||x - x_k||_*$ roste před tím, než dosáhne asymptotického chování odpovídajícímu $(\rho(M^{-1}N))^k$, říkáme *přechodový jev*.

Úloha 6. Naprogramujte Jacobiho a Gauss-Seidelovu metodu (doplňte předpřipravené skripty jacobi_errors.m pro Jacobiho a gs_errors.m pro Gauss-Seidelovu metodu) a vyzkoušejte jejich chování pomocí skriptu iteracni_metody_jac_gs.m.

[Hint: Nastudujte si v nápovědě MATLABu funkce diag (z matice "vyzobne" diagonálu jako vektor, z vektoru vytvoří diagonální matici), tril a triu.]

I na základě pozorování odpovězte na následující otázky, případně odkažte na konkrétní úlohu ze skriptu iteracni_metody_jac_gs.m:

- Konverguje-li metoda například v Euklidovské normě, musí konvergovat i v jiných vektorových normách?
- Kdy máme zaručenu monotonní konvergenci (například v Euklidovské normě)?

- Souvisí přítomnost přechodového jevu (tj. jevu, kdy chyba na začátku výpočtu nejprve roste) s velikostí maticových norem či spektrálního poloměru iterační matice?
- Lze v plné obecnosti vzájemně porovnat Jacobiho a Gauss-Seidelovu metodu? (Porovnáním máme na mysli výpovědi typu: Gauss-Seidelova metoda má vždy/nikdy rychlejší konvergenci než Jacobiho metoda. Jacobiho metoda konverguje pouze když/právě když Gauss-Seidelova metoda, atp.)