Vybrané slajdy k přednášce z předmětu

NUMERICKÉ METODY (12NME1, 12NMEA)

na KFE FJFI ČVUT v Praze

2. Numerické metody lineární algebry

Pracovní verze, 21. února 2024. Bude průběžně aktualizováno.

!!! TOTO NEJSOU SKRIPTA !!!

Tento dokument není náhradou přednášek, pouze doplňkem.
Neobsahuje všechna vysvětlení a odvození. Nepokrývá veškerou náplň předmětu, jejíž zvládnutí je nutné ke složení zkoušky.

Primárním zdrojem informací jsou přednášky, účast na nich důrazně doporučuji.

Opravy a připomínky prosím na `pavel.vachal@fjfi.cvut.cz`

Úlohy lineární algebry

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}$$

- Řešení soustav lineárních rovnic
  - Řešení soustav s regulární čtvercovou maticí a jednou nebo více pravými stranami
  - Výpočet inverzní matice $\mathbf{A^{-1}}$
  - Výpočet determinantu matice: $\det(\mathbf{A})$
  - Řešení lineárních soustav s jinými maticemi
    - Matice $m \times n$ (m rovnic o n neznámých)
    - Singulární čtvercové matice

    v určitém smyslu (jedno řešení + nulprostor, řešení ve smyslu nejm. čtverců, ...)
- Hledání vlastních čísel a vlastních vektorů
  - Úplný problém
  - Částečný problém

Vektorové a maticové normy

Vektorová norma

- Musí splňovat 3 podmínky:
  - a) $\|\vec{x}\| \geq 0, \quad \|\vec{x}\| = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0},$
  - b) $\|\lambda\,\vec{x}\| \;=\; |\lambda|\,\|\vec{x}\|$
  - c) $\|\vec{x}+\vec{y}\| \;\leq\; \|\vec{x}\| + \|\vec{y}\|$

▶ maximová

$$L_{\max}(\vec{x}) = \|\vec{x}\|_I = \max_i |x_i|$$

▶ součtová

$$L_1(\vec{x}) = \|\vec{x}\|_{II} = \sum\nolimits_i |x_i|$$

▶ eukleidovská

$$L_2(\vec{x}) = \|\vec{x}\|_{III} = \sqrt{\sum\nolimits_i x_i^2}$$

Maticová norma ($a_{ij} = a_{\check{r}\acute{a}d.,sl.}$)

≡ vekt. norma matice, která navíc splňuje podmínku pro násobení matic: $\forall\mathbf{A}$, $\forall\mathbf{B}$,

- d) $\|\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}\| \;\leq\; \|\mathbf{A}\|\;\|\mathbf{B}\|$

▶ řádková

$$\|\mathbf{A}\|_I = \max_i \sum\nolimits_j |a_{ij}|$$

▶ sloupcová

$$\|\mathbf{A}\|_{II} = \max_j \sum\nolimits_i |a_{ij}|$$

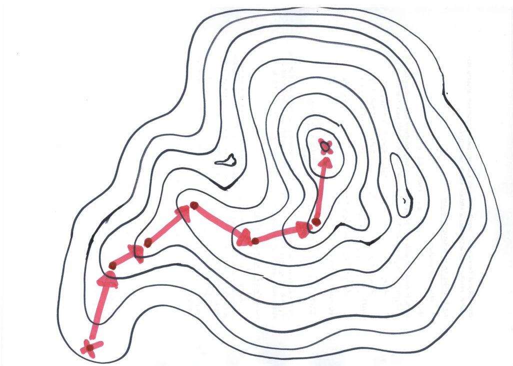
▶ eukleidovská

$$L_2(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_{III} = \sqrt{\sum\nolimits_i \sum\nolimits_j a_{ij}^2}$$

- Každá z těchto maticových norem je ***souhlasná*** se stejně označenou vektorovou normou, tedy $\forall\mathbf{A}, \forall\vec{x}, \quad \|\mathbf{A}\vec{x}\| \;\leq\; \|\mathbf{A}\|\,\|\vec{x}\|$

Metody řešení soustavy lineárních rovnic $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$

- Přímé (finitní)
  - přímý běh (úprava na $\triangle$ tvar) + zpětný běh
  - nebo úprava matice rovnou na diagonální tvar
- Iterační
  - postupné zpřesňování výsledku
- Minimalizací funkce $f = |\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}|$ nebo $f = \|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}\|_{III}$
  - např. gradientními metodami



Soustava s horní $\triangle$ maticí

$$\begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \dots & u_{1,n-1} & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \dots & u_{2,n-1} & u_{2,n} \\ 0 & 0 & u_{3,3} & \dots & u_{3,n-1} & u_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & u_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix}$$

Soustava s horní $\triangle$ maticí

$$\begin{pmatrix} u_{1,1} & u_{1,2} & u_{1,3} & \dots & u_{1,n-1} & u_{1,n} \\ 0 & u_{2,2} & u_{2,3} & \dots & u_{2,n-1} & u_{2,n} \\ 0 & 0 & u_{3,3} & \dots & u_{3,n-1} & u_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{n-1,n-1} & u_{n-1,n} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & u_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_{n-1} \\ b_n \end{pmatrix}$$

Zpětný běh:

- Předpokládejme, že $u_{ii} \neq 0, \forall i.$ Postupujeme ve směru klesajícího indexu k:

$$\begin{aligned} x_n &= \frac{b_n}{u_{n,n}} \\ x_{n-1} &= \frac{b_{n-1} - u_{n-1,n}\, x_n}{u_{n-1,n-1}} \quad \text{(protože} \quad u_{n-1,n-1}\, x_{n-1} + u_{n-1,n}\, x_n = b_{n-1}) \\ &\vdots \\ x_k &= \frac{1}{u_{k,k}} \left(b_k - \sum_{j=k+1}^{n} u_{k,j} x_j \right) \quad \text{pro} \quad k = n-2, \dots, 1 \end{aligned}$$

Gaussova eliminace

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \dots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{2,3} & \dots & a_{2,n} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} & \dots & a_{3,n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & a_{n,2} & a_{n,3} & \dots & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

Eliminace prvního sloupce:

$$a_{i,j}^{(1)} = a_{i,j} - \tfrac{a_{i,1}}{a_{1,1}}\, a_{1,j}, \qquad b_i^{(1)} = b_i - \tfrac{a_{i,1}}{a_{1,1}}\, b_1$$

$$\rightarrow \quad \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & a_{1,3} & \dots & a_{1,n} \\ 0 & a_{2,2}^{(1)} & a_{2,3}^{(1)} & \dots & a_{2,n}^{(1)} \\ 0 & a_{3,2}^{(1)} & a_{3,3}^{(1)} & \dots & a_{3,n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & a_{n,2}^{(1)} & a_{n,3}^{(1)} & \dots & a_{n,n}^{(1)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2^{(1)} \\ b_3^{(1)} \\ \vdots \\ b_n^{(1)} \end{pmatrix}$$

Maticově

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b} \quad \rightarrow \quad \mathbf{D}_1\mathbf{A}\vec{x} = \mathbf{D}_1\vec{b}, \qquad \text{kde} \quad \mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{a_{21}}{a_{11}} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{a_{31}}{a_{11}} & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{a_{n1}}{a_{11}} & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Gauss-Jordanova eliminace

$$\begin{pmatrix} a_{1,1}^{(n)} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{2,2}^{(n)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & a_{1,1}^{(n)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n,n}^{(n)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1^{(n)} \\ b_2^{(n)} \\ b_3^{(n)} \\ \vdots \\ b_n^{(n)} \end{pmatrix}$$

LU metoda

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \dots & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad (\mathbf{LU})\,\vec{x} = \vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad \mathbf{L}\overbrace{(\mathbf{U})\,\vec{x}}^{\text{ozn. } \vec{y}} = \vec{b} \quad \Leftrightarrow \quad \begin{cases} \mathbf{L}\vec{y} = \vec{b} \\ \mathbf{U}\vec{x} = \vec{y} \end{cases}$$

Odvození LU dekompozice
z definice násobení matic:

$$a_{ij} = \begin{cases} u_{ij} + \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}\, u_{kj} & \text{pro} \quad i \le j, \text{tedy nad diag.} \\ \sum\limits_{k=1}^{j} l_{ik}\, u_{kj} \;=\; l_{ij}\, u_{jj} + \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik}\, u_{kj} & \text{pro} \quad i > j, \ \text{tedy pod diag.} \end{cases}$$

$\Rightarrow$ $\boxed{\textbf{Croutův algoritmus:}}$

```
FOR J:=1 TO N DO BEGIN
    FOR I:=1 TO J DO
    FOR I:=J+1 TO N DO
END
```

FOR I:=1 TO J DO: $u_{ij} = a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}$

používá l z předchozích sloupců a u z předchozích řádků

FOR I:=J+1 TO N DO: $l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} \left(a_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} \right)$

používá l z předchozích sloupců a u z naddiagonální části sloupce

Iterativní zpřesnění řešení

▶ Odvození:

$$\mathbf{A}\left(\vec{x}+\delta\vec{x}\right)=\left(\vec{b}+\delta\vec{b}\right) \quad \Rightarrow \quad \left\{\begin{array}{lr} \bullet & \mathbf{A}\delta\vec{x}=\delta\vec{b} \\ \bullet & \mathbf{A}\left(\vec{x}+\delta\vec{x}\right)-\vec{b}=\delta\vec{b} \end{array}\right\} \quad \Rightarrow \mathbf{A}\underbrace{\delta\vec{x}}_{\text{ozn. }\left(\delta\vec{x}\right)^{(i)}}=\mathbf{A}\underbrace{\left(\vec{x}+\delta\vec{x}\right)}_{\text{ozn. }\vec{x}^{(i)}}-\vec{b}$$

▶ Postup:

Odhadneme přibližné řešení $\mathbf{A}\vec{x}^{(0)}=\vec{b}$ a pak iterujeme

- Hledám $\left(\delta\vec{x}\right)^{(i)}$ tak, aby $\mathbf{A}\left(\delta\vec{x}\right)^{(i)}=\mathbf{A}\vec{x}^{(i)}-\vec{b}$
- $\vec{x}^{(i+1)}=\vec{x}^{(i)}-\left(\delta\vec{x}\right)^{(i)}$
- $i=i+1$

Podmíněnost řešení soustavy lin. rovnic $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$

- Pro $\boldsymbol{\Delta}\mathbf{A} = \mathbf{0}$:

$$\frac{\|\Delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|} \leq \underbrace{\|\mathbf{A}\|\,\|\mathbf{A}^{-1}\|}_{\text{ozn. } C_p} \frac{\|\Delta\vec{b}\|}{\|\vec{b}\|}$$

- Pro $\boldsymbol{\Delta}\mathbf{A} \neq \mathbf{0}$:

$$\frac{\|\Delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|} \leq C_p \frac{\frac{\|\boldsymbol{\Delta}\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|} + \frac{\|\Delta\vec{b}\|}{\|\vec{b}\|}}{1 - C_p \frac{\|\boldsymbol{\Delta}\mathbf{A}\|}{\|\mathbf{A}\|}}$$

▶ Příklad: Dvě soustavy se stejnou maticí, $C_p = \|\mathbf{A}\|\,\|\mathbf{A}^{-1}\| \approx 40\,002$:

$$\begin{aligned} x + y &= 2, \\ x + 1.0001y &= 2.0001 \end{aligned}$$

Řešení: $x = 1,\ y = 1$

$$\begin{aligned} x + y &= 2, \\ x + 1.0001y &= 2.0002 \end{aligned}$$

Řešení: $x = 0,\ y = 2$

Obecný význam podmíněnosti - skalární případ $y = f(x)$:

- $$\hat{y} - y \quad = \quad f(x + \Delta x) - f(x) \quad = \quad f'(x)\,\Delta x + \frac{f''(x + \theta\Delta x)}{2!}(\Delta x)^2, \qquad \theta \in (0, 1),$$

$$\Rightarrow \frac{\hat{y} - y}{y} \quad = \quad \frac{\hat{y} - y}{f(x)}\,\frac{x}{x} \quad = \quad \left(\frac{x\,f'(x)}{f(x)}\right)\frac{\Delta x}{x} \;+\; \mathcal{O}((\Delta x)^2)$$

- Odtud definice $c(x) \;=\; \left|\frac{x\,f'(x)}{f(x)}\right|$

▶ Příklad: $f(x) = \ln(x)$, $\qquad c(x) = \left|\frac{x\,\frac{1}{x}}{\ln(x)}\right| = \left|\frac{1}{\ln(x)}\right|$

Tridiagonální matice

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & a_{n-2} & b_{n-2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & c_n & a_n \end{pmatrix}.$$

Řešíme soustavu $\mathbf{T}\vec{x} = \vec{f}$.

- ◇ Předpokládáme zpětný běh ve tvaru $$x_k = \mu_k\, x_{k+1} + \rho_k. \qquad (1)$$
- ◇ j-tý řádek soustavy je $c_j x_{j-1} + a_j x_j + b_j x_{j+1} = f_j$. Po dosazení (1) máme

  $c_j \underbrace{(\mu_{j-1}\, x_j + \rho_{j-1})}_{x_{j-1}} + a_j\, x_j + b_j\, x_{j+1} = f_j$ neboli $(c_j \mu_{j-1} + a_j)\, x_j + b_j x_{j+1} = f_j - c_j \rho_{j-1}$

  a tedy po vykrácení závorkou $$x_j = \frac{-b_j}{c_j \mu_{j-1} + a_j}\, x_{j+1} + \frac{f_j - c_j \rho_{j-1}}{c_j \mu_{j-1} + a_j}.$$
- ◇ Po srovnání s předpokladem (1) dostáváme

$$\mu_j = \frac{-b_j}{c_j \mu_{j-1} + a_j}, \qquad \rho_j = \frac{f_j - c_j \rho_{j-1}}{c_j \mu_{j-1} + a_j}. \qquad (2)$$

$\Rightarrow$ Algoritmus: “přímý běh” $\mu_1, \rho_1, \mu_2, \rho_2, \dots$ dle (2), “zpětný běh” $x_n, x_{n-1}, \dots$ dle (1).

- ◇ Inicializace: $c_1 = 0$, $b_n = 0$, μ_0, ρ_0 a x_{n+1} libovolné.

Příklad: **Numerické řešení ODR** $y''(x) = \cos(\alpha x)$, $x \in \langle 0, 1\rangle$, $y(0) = y(1) = 0$

- POZN.: Uměli bychom vyřešit i analyticky: $y(x) = \frac{-\cos(\alpha x)+(\cos(\alpha)-1)x+1}{\alpha^2}$
- Po diskretizaci ODR na n intervalů dostaneme systém

$$
\begin{aligned}
y_1 &= 0 \\
\frac{y_{i-1} - 2y_i + y_{i+1}}{\Delta x^2} &= \cos(\alpha x_i) \qquad \text{pro} \quad i = 2, \dots, n \\
y_{n+1} &= 0,
\end{aligned}
$$

kde $\Delta x = \frac{1}{n}$ a tedy

$$
\begin{aligned}
y_1 &= 0 \\
-y_{i-1} + 2y_i - y_{i+1} &= -\frac{1}{n^2}\cos(\alpha x_i) \qquad \text{pro} \quad i = 2, \dots, n \\
y_{n+1} &= 0.
\end{aligned}
$$

Tuto soustavu lze zapsat maticově jako

$$
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & \dots & 0 & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 & -1 \\
0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 1
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \\ y_{n+1}
\end{pmatrix}
= -\frac{1}{n^2}
\begin{pmatrix}
0 \\ \cos(\alpha x_2) \\ \cos(\alpha x_3) \\ \vdots \\ \cos(\alpha x_{n-1}) \\ \cos(\alpha x_n) \\ 0
\end{pmatrix}
$$

Metoda SVD (Singular Value Decomposition)

- Matici $\mathbf{A}$ rozložíme jako $\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{V^T}$, kde

$$\begin{array}{ll} \mathbf{A} \in \mathcal{R}^{m\times n}, & \mathbf{V} \in \mathcal{R}^{n\times n} \text{ je ortogonální,} \\ \mathbf{U} \in \mathcal{R}^{m\times n} \text{ je sloupcově ortogonální,} & \mathbf{W} \in \mathcal{R}^{n\times n} \text{ je diagonální.} \end{array}$$

  - ▶ $m > n$: "overdetermined"

$$\begin{pmatrix} & & \\ & \mathbf{A} & \\ & & \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & \mathbf{U} & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} w_1 & & \\ & \ddots & \\ & & w_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & \mathbf{V^T} & \end{pmatrix}$$

  - ▶ $m < n$: "underdetermined"

$$\begin{pmatrix} & \mathbf{A} & \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} & \mathbf{U} & \end{pmatrix}}_{m \text{ sloupců OG, ostatní nulové}} \begin{pmatrix} w_1 & & & & \\ & w_2 & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & w_{n-1} & \\ & & & & w_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} & & \\ & \mathbf{V^T} & \\ & & \end{pmatrix}$$

- Převedeme na druhou stranu $\qquad \mathbf{A}\vec{x} = \vec{b} \qquad \Leftrightarrow \qquad \mathbf{U} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{V^T}\vec{x} = \vec{b}$

- Budeme tedy počítat

$$\vec{x} = \mathbf{V} \cdot \widetilde{\mathbf{W}} \cdot \mathbf{U^T}\vec{b}, \qquad \text{kde} \qquad \widetilde{\mathbf{W}} = \mathrm{diag}\left(\tilde{w}_1, \ldots, \tilde{w}_n\right), \qquad \tilde{w} = \begin{cases} 0 & \text{pro} \quad w_i \approx 0, \\ \frac{1}{w_i} & \text{jinak.} \end{cases}$$

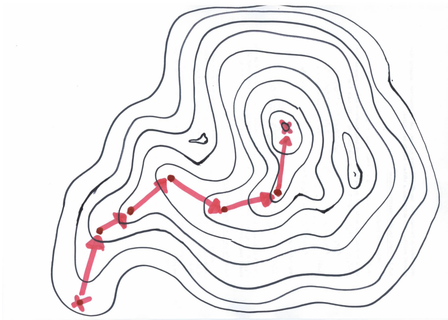
Řešení lineární soustavy pomocí gradientních metod

- Problém řešení $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ převedeme na úlohu minimalizace funkce více proměnných, např.

$$f(\vec{x}) \;=\; \frac{1}{2}\left\|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}\right\|_{III} \;=\; \frac{1}{2}\left|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}\right|^2 \tag{1}$$

- Obecný postup gradientních metod:
  - Minimum funkce $f(\vec{x})$ hledáme postupnou 1D minimalizací, vždy na přímce dané bodem $\vec{x}^{(k)}$ a vektorem $\vec{s}^{(k)}$.
  - Tedy v k-tém kroku hledáme na přímce $\vec{x} = \vec{x}^{(k)} + \lambda\vec{s}^{(k)}$ bod, ve kterém je hodnota funkce $f(\vec{x})$ minimální.
  - Tento bod ozn. $\vec{x}^{(k+1)}$ a zvolíme v něm nový směr $\vec{s}^{(k+1)}$.
  - Nejjednodušší gradientní metody hledají vždy ve směru nejprudšího klesání, tedy (jednotkového) vektoru

$$\vec{s} = -\frac{\nabla f}{\|\nabla f\|_{III}}.$$



- Tedy konkrétně pro řešení lineárního systému $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ minimalizujeme funkci (1) tím, že v každém kroku hledáme λ takové, aby $f(\vec{x} + \lambda\vec{s})$ bylo minimální. To znamená

$$\lambda = \frac{-\vec{s}\,\nabla f}{|\mathbf{A}\vec{s}|^2}, \qquad \text{kde} \qquad \nabla f(\vec{x}) = \mathbf{A}^T(\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b})$$

a směr $\vec{s}$ je dán konkrétní použitou gradientní metodou.

Iterační metody: Řízená relaxace

- Pro jednoduchost uvažujme matici $\mathbf{A}$, která má na diagonále jedničky (tedy $\forall i,\ a_{i,i} = 1$)

- V $k+1$. iteraci vynulujeme j-tou (maximální) složku rezidua $|(\mathbf{A}\vec{x})_j - b_j|$ (j-tý řádek):

$$x_j^{(k+1)} = b_j - a_{j,1}x_1^{(k)} - \ldots - a_{j,j-1}x_{j-1}^{(k)} - a_{j,j+1}x_{j+1}^{(k)} - \ldots - a_{j,n}x_n^{(k)}$$

- Máme tedy iterační proces $\quad \vec{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_k\vec{x}^{(k)} + \vec{c}_k, \quad$ kde

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ -a_{j,1} & \ldots & -a_{j,j-1} & 0 & -a_{j,j+1} & \ldots & -a_{j,n} \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix}, \qquad \vec{c}_k = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ b_j \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Konvergence stacionárních iteračních metod

- Po k iteracích s konstantní iterační maticí $\mathbf{B}$ máme

$$\left(\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right) \;=\; \mathbf{B}\left(\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}\right) \;=\; \cdots \;=\; \mathbf{B}^k\left(\vec{x}^{(0)} - \vec{x}\right)$$

a tedy chceme, aby

$$\lim_{k\to\infty} \mathbf{B}^k = \mathbf{0}.$$

- Motivace: speciální případ $\mathbf{B} = \mathbf{\Lambda} = \operatorname{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_n)$. Potom

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda}^2 &= \operatorname{diag}\left(\lambda_1^2, \ldots, \lambda_n^2\right) \\ &\vdots \\ \mathbf{\Lambda}^k &= \operatorname{diag}\left(\lambda_1^k, \ldots, \lambda_n^k\right). \end{aligned}$$

Aby $\lim\limits_{k\to\infty} \mathbf{\Lambda}^k = \mathbf{0}$, musí tedy $\forall i, |\lambda_i| < 1$.

- $\boxed{\text{VĚTA:}}$ Iterační metoda konverguje právě když $\rho(\mathbf{B}) = \max\limits_i |\lambda_i| < 1$

- $\boxed{\text{VĚTA:}}$ Pokud v <u>*některé*</u> normě platí $\|\mathbf{B}\| < 1$, potom iterační metoda konverguje

Iterační metody: Prostá iterace

- Soustavu $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ formálně upravíme na

$$\vec{b} \;=\; \mathbf{A}\vec{x} - \vec{x} + \vec{x} \;=\; \mathbf{A}\vec{x} - \mathbf{I}\vec{x} + \vec{x} \;=\; (\mathbf{A} - \mathbf{I})\,\vec{x} + \vec{x}$$

a tedy

$$\underbrace{\vec{x}}_{\text{volíme } \vec{x}^{(k+1)}} \;=\; (\mathbf{I} - \mathbf{A}) \underbrace{\vec{x}}_{\text{volíme } \vec{x}^{(k)}} + \vec{b},$$

což odpovídá předpisu iterační metody s maticí $(\mathbf{I} - \mathbf{A})$.

- U metody prosté iterace lze přesnost k-té iterace odhadnout jako

$$\left\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\right\| \;\leq\; \|\mathbf{B}\|^k \left(\left\|\vec{x}^{(0)}\right\| + \frac{\|\vec{b}\|}{1 - \|\mathbf{B}\|} \right),$$

kde $\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{A}$.

Iterační metody: Jacobiho metoda

- Soustavu upravíme na

$$\begin{aligned} \vec{b} = \mathbf{A}\vec{x} \quad &= \quad \mathbf{L}\vec{x} + \mathbf{D}\vec{x} + \mathbf{R}\vec{x} \\ \Rightarrow \quad & \mathbf{D}\vec{x} = \vec{b} - (\mathbf{L} + \mathbf{R})\,\vec{x} \\ \Rightarrow \quad & \vec{x} = \mathbf{D^{-1}}\vec{b} - \mathbf{D^{-1}}\,(\mathbf{L} + \mathbf{R})\,\vec{x} \end{aligned}$$

- Budeme tedy iterovat $\boxed{\vec{x}^{(k+1)} = -\mathbf{D^{-1}}\,(\mathbf{L} + \mathbf{R})\,\vec{x}^{(k)} + \mathbf{D^{-1}}\vec{b}}$, neboli po složkách

$$x_j^{(k+1)} = -\frac{a_{j,1}}{a_{j,j}} x_1^{(k)} - \ldots - \frac{a_{j,j-1}}{a_{j,j}} x_{j-1}^{(k)} - \frac{a_{j,j+1}}{a_{j,j}} x_{j+1}^{(k)} - \ldots - \frac{a_{j,n}}{a_{j,j}} x_n^{(k)} + \frac{b_j}{a_{j,j}}.$$

VĚTA: <u>$\mathbf{A}$ je diagonálně dominantní $\Rightarrow$ Jacobiho metoda konverguje.</u>

DŮKAZ: v řádkové či sloupcové normě

$$\begin{aligned} \left\| \mathbf{D^{-1}}\,(\mathbf{L} + \mathbf{R}) \right\| &= \max_i \sum_{j=1}^{n} \left| \left(\mathbf{D^{-1}}\,(\mathbf{L} + \mathbf{R}) \right)_{i,j} \right| = \\ &= \max_i \frac{1}{|a_{i,i}|} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{i,j}| \overset{\substack{\text{diag.}\\ \text{dom.}}}{<} \\ &\overset{\substack{\text{diag.}\\ \text{dom.}}}{<} \max_i \frac{|a_{i,i}|}{|a_{i,i}|} = 1. \end{aligned}$$

Iterační metody: Gauss-Seidelova metoda

- $k+1$. iterace, j-tý řádek:

$$x_j^{(k+1)} = -\frac{a_{j,1}}{a_{j,j}} x_1^{\boxed{(\mathrm{k+1})}} - \ldots - \frac{a_{j,j-1}}{a_{j,j}} x_{j-1}^{\boxed{(\mathrm{k+1})}} - \frac{a_{j,j+1}}{a_{j,j}} x_{j+1}^{(k)} - \ldots - \frac{a_{j,n}}{a_{j,j}} x_n^{(k)} + \frac{b_j}{a_{j,j}},$$

neboli v maticovém zápisu

$$\vec{x}^{(k+1)} = -\left(\mathbf{L}+\mathbf{D}\right)^{-\mathbf{1}} \mathbf{R}\vec{x}^{(k)} + \left(\mathbf{L}+\mathbf{D}\right)^{-\mathbf{1}} \vec{b}.$$

Iterační metody: Superrelaxační metoda

- Jako Gauss-Seidelova, ale s urychlenou konvergencí:

$$\vec{x}^{(k+1),\mathrm{SR}} = \vec{x}^{(k)} + \omega \left[\Delta\vec{x}^{(k)}\right]_{\mathrm{GS}}, \qquad \text{kde} \qquad \left[\Delta\vec{x}^{(k)}\right]_{\mathrm{GS}} = \vec{x}^{(k+1),\mathrm{GS}} - \vec{x}^{(k)}$$

- Optimální relaxační parametr

$$\omega_{\mathrm{opt}} = \frac{2}{1+\sqrt{1-\rho^2\left(\mathbf{B}\right)}} = \frac{2}{1+\sqrt{1-\rho^2\left(\left(\mathbf{L}+\mathbf{D}\right)^{-\mathbf{1}}\mathbf{R}\right)}}$$

Hledání vlastních čísel: pojmy, definice, vlastnosti matic

- Vlastní číslo, vlastní vektor
- Úplný vs. částečný problém vlastních čísel
- Charakteristický polynom matice, násobnost vlastního čísla
- Defektní matice
- Symetrická matice
- Normální matice
- Trojúhelníková matice
- Podobné matice
  - Podobné matice mají stejná všechna vlastní čísla

$$\det\left(\mathbf{P^{-1}AP}-\lambda\mathbf{I}\right)=\det\left(\mathbf{P^{-1}AP}-\lambda\mathbf{P^{-1}IP}\right)=\det\left(\mathbf{P^{-1}}\left(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}\right)\mathbf{P}\right)=$$
$$=\det\left(\mathbf{P^{-1}}\right)\det\left(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}\right)\det\left(\mathbf{P}\right)=\det\left(\mathbf{A}-\lambda\mathbf{I}\right)$$

  - Matice v Jordanově normálním (kanonickém) tvaru

$$\mathbf{J}=\begin{pmatrix}\mathbf{J}_1 & 0 & \dots & 0\\ 0 & \mathbf{J}_2 & \dots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{J}_s\end{pmatrix}\qquad \text{kde} \qquad \mathbf{J}_i=\begin{pmatrix}\lambda_i & 0 & \dots & 0 & 0\\ 1 & \lambda_i & \dots & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & \dots & \lambda_i & 0\\ 0 & 0 & \dots & 1 & \lambda_i\end{pmatrix}$$

Hledání vlastních čísel: Jacobiho transformace

Z celé matice

$$\mathbf{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{1,1}^{(k)} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & a_{1,n}^{(k)} \\ \vdots & \ddots & & & & & \vdots \\ \vdots & & a_{p,p}^{(k)} & \cdots & a_{p,q}^{(k)} & & \vdots \\ \vdots & & \vdots & \ddots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & & a_{p,q}^{(k)} & \cdots & a_{q,q}^{(k)} & & \vdots \\ \vdots & & & & & \ddots & \vdots \\ a_{n,1}^{(k)} & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & a_{n,n}^{(k)} \end{pmatrix}$$

se soustředíme na submatici 2×2 tvořenou

$$\mathcal{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{p,p}^{(k)} & a_{p,q}^{(k)} \\ a_{p,q}^{(k)} & a_{q,q}^{(k)} \end{pmatrix}$$

a chceme ji diagonalizovat.

- Otočíme osy o vhodný úhel $\varphi^{(k)}$, neboli vynásobíme

$$\mathcal{A}^{(k+1)} = \mathcal{M}^T \mathcal{A}^{(k)} \mathcal{M} = \begin{pmatrix} \cos\varphi^{(k)} & \sin\varphi^{(k)} \\ -\sin\varphi^{(k)} & \cos\varphi^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{p,p}^{(k)} & a_{p,q}^{(k)} \\ a_{p,q}^{(k)} & a_{q,q}^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi^{(k)} & -\sin\varphi^{(k)} \\ \sin\varphi^{(k)} & \cos\varphi^{(k)} \end{pmatrix}.$$

- Nová hodnota prvku $a_{p,q}^{(k+1)}$ je $\quad a_{p,q}^{(k+1)} = \left(\cos^2\varphi^{(k)} - \sin^2\varphi^{(k)}\right) a_{p,q}^{(k)} - \cos\varphi^{(k)} \sin\varphi^{(k)} \left(a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}\right).$

- Aby $a_{p,q}^{(k+1)} = 0$, musí být pravá strana rovna nule:

$$0 \stackrel{!}{=} \cos 2\varphi^{(k)} a_{p,q}^{(k)} - \frac{1}{2} \sin 2\varphi^{(k)} \left(a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}\right) \qquad \text{neboli} \qquad \operatorname{tg} 2\varphi^{(k)} = \frac{2\ a_{p,q}^{(k)}}{a_{p,p}^{(k)} - a_{q,q}^{(k)}}.$$

- V $k+1$. kroku Jacobiho transformace tedy máme submatici

$$\mathcal{A}^{(k)} = \begin{pmatrix} a_{p,p}^{(k)} & a_{p,q}^{(k)} \\ \\ a_{p,q}^{(k)} & a_{q,q}^{(k)} \end{pmatrix} \qquad \text{transformovánu na} \qquad \mathcal{A}^{(k+1)} = \begin{pmatrix} a_{p,p}^{(k+1)} & 0 \\ \\ 0 & a_{q,q}^{(k+1)} \end{pmatrix}.$$

- Transformace celé matice je tedy

$$\mathbf{A}^{(k+1)} = \mathbf{M}_{\mathbf{p,q}}^{T}\, \mathbf{A}^{(k)}\, \mathbf{M}_{\mathbf{p,q}},$$

  kde $\mathbf{M}_{\mathbf{p,q}}$ je tzv. *Givensova rotační matice*

$$\mathbf{M}_{\mathbf{p,q}} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & & & \\ & & \cos\varphi^{(k)} & & & -\sin\varphi^{(k)} & & \\ & & & \ddots & & & & \\ & & & & 1 & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & \sin\varphi^{(k)} & & & \cos\varphi^{(k)} & & \\ & & & & & & \ddots & \\ 0 & & & & & & & 1 \end{pmatrix}.$$

Jacobiho transformace - Důkaz konvergence

- Označíme součet čtverců mimodiag. prvků jako $$t(\mathbf{A}) = \sum_{i,j;\, j\neq i}^{n} a_{i,j}^2 = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1;\, j\neq i}^{n} a_{i,j}^2.$$
- V k-té iteraci jsme vynulovali prvek $a_{p,q}$ $$\Rightarrow \quad \underbrace{\sum_{i,j;\, j\neq i}^{n} (a_{i,j}^{(k)})^2}_{t(\mathbf{A}^{(k)})} = \underbrace{\sum_{i,j;\, j\neq i}^{n} (a_{i,j}^{(k-1)})^2}_{t(\mathbf{A}^{(k-1)})} - 2\, a_{p,q}^2. \qquad (1)$$
- $a_{p,q}$ byl pivot mezi mimodiag. prvky $\mathbf{A}^{(k-1)}$ $\quad \Rightarrow \quad \forall\{(i,j),\, j\neq i\}, \quad (a_{i,j}^{(k-1)})^2 \leq a_{p,q}^2.$
- Protože mimodiagonálních prvků je $n(n-1)$, platí $$\underbrace{\sum_{i,j;\, j\neq i}^{n} (a_{i,j}^{(k-1)})^2}_{t(\mathbf{A}^{(k-1)})} \leq n(n-1)\, a_{p,q}^2 \qquad \Longleftrightarrow \qquad a_{p,q}^2 \geq \tfrac{t(\mathbf{A}^{(k-1)})}{n(n-1)}. \qquad (2)$$
- Dosadíme (2) do (1) a máme

$$\begin{aligned} t(\mathbf{A}^{(k)}) &= t(\mathbf{A}^{(k-1)}) - 2\, a_{p,q}^2 \leq t(\mathbf{A}^{(k-1)}) - 2\, \frac{t(\mathbf{A}^{(k-1)})}{n(n-1)} = \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right) t(\mathbf{A}^{(k-1)}) \\ &\leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right)^2 t(\mathbf{A}^{(k-2)}) \leq \left(1 - \frac{2}{n(n-1)}\right)^k t(\mathbf{A}^{(0)}), \end{aligned}$$

kde $\mathbf{A}^{(0)} = \mathbf{A}$ je původní matice.
Posloupnost jsme shora odhadli geometrickou posloupností s kvocientem < 1. $\square$

Částečný problém vlastních čísel

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} u_1^1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ u_2^1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ u_3^1 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_n^1 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{P^{-1}AP} = \begin{pmatrix} \lambda_1 & \vec{q}^T \\ \vec{0} & \mathbf{B} \end{pmatrix},$$

Jak to, že to funguje? Např. pro matici $\mathbf{A}^{3\times 3}$ s vlastními vektory $\vec{\nu}_{1,2,3}$:

- Libovolný vektor můžeme zapsat jako $\vec{x} = \alpha_1\,\vec{\nu}_1 + \alpha_2\,\vec{\nu}_2 + \alpha_3\,\vec{\nu}_3$.
- Z linearity plyne, že
$$\begin{aligned} \mathbf{A}\vec{x} &= \mathbf{A}\,(\alpha_1\,\vec{\nu}_1 + \alpha_2\,\vec{\nu}_2 + \alpha_3\,\vec{\nu}_3) = \\ &= \alpha_1\,\mathbf{A}\,\vec{\nu}_1 + \alpha_2\,\mathbf{A}\,\vec{\nu}_2 + \alpha_3\,\mathbf{A}\,\vec{\nu}_3 = \\ &= \alpha_1\,\lambda_1\,\vec{\nu}_1 + \alpha_2\,\lambda_2\,\vec{\nu}_2 + \alpha_3\,\lambda_3\,\vec{\nu}_3. \end{aligned}$$
- Po dalším vynásobení: $\mathbf{AA}\vec{x} = \alpha_1\,\lambda_1^2\,\vec{\nu}_1 + \alpha_2\,\lambda_2^2\,\vec{\nu}_2 + \alpha_3\,\lambda_3^2\,\vec{\nu}_3$, atd.,

  tedy po n vynásobeních: $\mathbf{A}^n\vec{x} = \alpha_1\,\lambda_1^n\,\vec{\nu}_1 + \alpha_2\,\lambda_2^n\,\vec{\nu}_2 + \alpha_3\,\lambda_3^n\,\vec{\nu}_3$.
- BÚNO předpokládejme, že $|\lambda_1| > |\lambda_2| > |\lambda_3|$

$$\Rightarrow \quad \text{pro velká } n \text{ platí } |\lambda_1|^n \gg |\lambda_2|^n \gg |\lambda_3|^n$$

$$\Rightarrow \quad \mathbf{A}^n\vec{x} \approx \alpha_1\,\lambda_1^n\,\vec{\nu}_1. \qquad \square$$