

Aplikovaná matematika – učební text

J. Stebel

9. října 2013

1 Úvod – základní pojmy

1.1 Značení

\mathbb{N}	množina přirozených čísel $(1, 2, 3, \dots)$
\mathbb{Z}	množina celých čísel
\mathbb{Q}	množina racionálních čísel
\mathbb{R}	množina reálných čísel
\mathbb{C}	množina komplexních čísel
$A \subset B$	A je částí (podmnožinou) B
$A \cap B$	průnik
$A \cup B$	sjednocení
$A \setminus B$	rozdíl množin
$A \times B$	kartézský součin
(a_1, \dots, a_n)	uspořádaná n -tice
(a, b)	otevřený interval
$[a, b]$	uzavřený interval

1.2 Relace a zobrazení

Definice 1 Binární relace, nebo také jen relace, mezi množinami A a B je libovolná podmnožina kartézského součinu $A \times B$.

Je-li R relace mezi A a B , pak skutečnost, že $(a, b) \in R$ zapisujeme také výrazem aRb . Např. mezi množinami $A = \{\text{Adam}, \text{Sókratés}, \text{Karel IV.}\}$ a $B = \{\text{Eva}, \text{Xantippa}, \text{Marie Terezie}\}$ lze zavést relaci partnerství $P = \{(\text{Adam}, \text{Eva}), (\text{Sókratés}, \text{Xantippa})\}$. Jiným příkladem relace je uspořádání na množině \mathbb{R} , reprezentované symbolem \leq , nebo rovnost prvků v \mathbb{R} .

Symetrická relace je taková relace R na množině A (tedy $R \subset A \times A$), která splňuje

$$(a, b) \in R \Leftrightarrow (b, a) \in R.$$

Příkladem symetrické relace je rovnost mezi reálnými čísly.

Tranzitivní relace R na množině A splňuje

$$(a, b) \in R \& (b, c) \in R \Rightarrow (a, c) \in R.$$

Relace $<$ na množině \mathbb{R} je tranzitivní.

Reflexivní relace je taková relace R na množině A , pro kterou platí:

$$\forall a \in A : (a, a) \in R.$$

Relace $=$, \leq jsou reflexivní, $<$ není reflexivní.

Zobrazení f množiny A do množiny B je relace $f \subset A \times B$, která splňuje:

$$\forall a \in A \exists ! b \in B : (a, b) \in f.$$

Píšeme také $f : A \rightarrow B$, $f : a \mapsto b$, $f(a) = b$.

Obraz množiny A' při zobrazení $f : A \rightarrow B$ je množina

$$f(A') := \{f(a); a \in A'\}.$$

Prosté zobrazení má vlastnost

$$f(a_1) = f(a_2) \Rightarrow a_1 = a_2.$$

Inverzní zobrazení k prostému zobrazení $f : A \rightarrow B$ je zobrazení $f^{-1} : f(A) \rightarrow A$ definované předpisem

$$f^{-1}(b) = a \Leftrightarrow f(a) = b.$$

Surjektivní zobrazení splňuje

$$f(A) = B.$$

Někdy také říkáme, že f zobrazuje A na B .

Isomorfní zobrazení, nebo jen isomorfismus, je zobrazení, které je zároveň prosté a surjektivní. Existuje-li mezi A a B isomorfismus, říkáme, že A a B jsou isomorfní.

Pomocí isomorfismů můžeme zavést tyto kategorie množin: Řekneme, že množina je konečná, pokud je isomorfní s množinou $\{1, \dots, n\}$ pro nějaké číslo $n \in \mathbb{N}$. Spočetná množina je isomorfní s nějakou (ne nutně konečnou) podmnožinou \mathbb{N} . Množina, která není konečná, se nazývá nekonečná. Množina, která není spočetná, se nazývá nespočetná.

Např. \mathbb{N} , \mathbb{Z} , \mathbb{Q} jsou spočetné, \mathbb{R} je nespočetná.

Složené zobrazení. Je-li $f : A \rightarrow B$ a $g : B \rightarrow C$, pak $g \circ f : A \rightarrow C$ je zobrazení složené z f a g , které je definováno vztahem

$$g \circ f(a) = g(f(a)).$$

1.3 Vektorové prostory

Definice 2 *Neprázdná množina V , na které je definováno sčítání $+$: $V \times V \rightarrow V$ a násobení reálným číslem \cdot : $\mathbb{R} \times V \rightarrow V$, se nazývá **reálný vektorový prostor** (nebo také **lineární prostor**), jestliže pro každé $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in V$ a každé $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ platí:*

1. $\forall \vec{x}, \vec{y} \in V : \vec{x} + \vec{y} = \vec{y} + \vec{x}$ (komutativita sčítání)
2. $\forall \vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in V : (\vec{x} + \vec{y}) + \vec{z} = \vec{x} + (\vec{y} + \vec{z})$ (asociativita sčítání)
3. $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \forall \vec{x} \in V : \alpha \cdot (\beta \cdot \vec{x}) = (\alpha\beta) \cdot \vec{x}$ (asociativita násobení)
4. $\forall \alpha \in \mathbb{R} \forall \vec{x}, \vec{y} \in V : \alpha \cdot (\vec{x} + \vec{y}) = \alpha \cdot \vec{x} + \alpha \cdot \vec{y}$ (distributivita sčítání prvků z V)
5. $\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R} \forall \vec{x} \in V : (\alpha + \beta) \cdot \vec{x} = \alpha \cdot \vec{x} + \beta \cdot \vec{x}$ (distributivita sčítání čísel)
6. $\forall \vec{x} \in V : 1 \cdot \vec{x} = \vec{x}$ (vlastnost reálného čísla 1)
7. $\exists \vec{0} \in V \forall \vec{x} \in V : 0 \cdot \vec{x} = \vec{0}$ (existence nulového prvku)

Prvky vektorového prostoru nazýváme **vektory**. Reálným číslům v kontextu násobení $\cdot : \mathbb{R} \times V \rightarrow V$ říkáme **skaláry**. Prvek $\vec{0}$ nazýváme **nulový prvek** nebo **nulový vektor**. Z axiomů uvedených v definici vektorového prostoru lze odvodit, že pro nulový prvek $\vec{0} \in V$ platí:

- $\forall \vec{x} \in V : \vec{x} + \vec{0} = \vec{x}$,
- $\forall \alpha \in \mathbb{R} : \alpha \cdot \vec{0} = \vec{0}$,
- $\forall \vec{x} \in V \forall \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0 : \alpha \cdot \vec{x} = \vec{0} \Rightarrow \vec{x} = \vec{0}$.

Příklady vektorových prostorů:

- euklidovské prostory $\mathbb{R}, \mathbb{R}^2, \mathbb{R}^n$ (násobení skalárem i sčítání po složkách)
- triviální prostor $\{\vec{0}\}$ ($\alpha\vec{0} = \vec{0} + \vec{0} = \vec{0}$)
- prostor \mathcal{F} reálných funkcí jedné reálné proměnné ($(\alpha f)(x) := f(\alpha x)$, $(f + g)(x) := f(x) + g(x)$)
- prostor polynomů \mathcal{P}
- prostor \mathcal{P}_n polynomů stupně $\leq n$

Definice 3 *Řekneme, že W je **podprostorem** vektorového prostoru V , jestliže je $W \subset V$ a množina W s operacemi sčítání a násobení skalárem převzatými z V je vektorový prostor.*

Např. \mathcal{P}_n je podprostorem \mathcal{P} a oba jsou podprostory \mathcal{F} .

Pro zjištění, zda je nějaká množina podprostorem, není nutné ověřovat všech 7 vlastností z Definice 2. Následující tvrzení tuto proceduru usnadňuje.

Věta 1 *Nechť V je vektorový prostor a $\emptyset \neq W \subset V$. Pak W je podprostorem V právě tehdy, když platí*

- (i) *pro každé $\vec{x}, \vec{y} \in W$ je $\vec{x} + \vec{y} \in W$,*
- (ii) *pro každé $\vec{x} \in W$ a $\alpha \in \mathbb{R}$ je $\alpha\vec{x} \in W$.*

Platí, že průnik dvou vektorových prostorů je vektorový prostor. Sjednocení vektorových prostorů tuto vlastnost nemá. Příklad: Jsou-li $A = \{(\alpha, 0); \alpha \in \mathbb{R}\}$ a $B = \{(0, \beta); \beta \in \mathbb{R}\}$ dva podprostory \mathbb{R}^2 , pak $A \cap B = \{\vec{0}\}$ je triviální prostor. Naproti tomu $A \cup B = \{(\alpha, \beta); \alpha = 0 \text{ nebo } \beta = 0\}$ není vektorový prostor, neboť např. $(1, 0) + (0, 1) = (1, 1) \notin A \cup B$.

Definice 4 *Nechť $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ jsou prvky vektorového prostoru V a $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ jsou reálná čísla. Vektor*

$$\alpha_1\vec{x}_1 + \alpha_2\vec{x}_2 + \dots + \alpha_n\vec{x}_n$$

se nazývá lineární kombinací vektorů $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$. Číslům $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ říkáme koeficienty lineární kombinace.

Definice 5 *Triviální lineární kombinace vektorů $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_n$ je taková lineární kombinace, která má všechny koeficienty nulové. Netriviální lineární kombinace je taková, že alespoň jeden její koeficient je nenulový.*

Poznámka: Triviální lineární kombinace je vždy rovna nulovému vektoru.

Definice 6 *Konečnou množinu vektorů $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n\}$ nazýváme lineárně závislou, pokud existuje netriviální lineární kombinace těchto vektorů, která je rovna nulovému vektoru. Stručně říkáme, že vektory $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$ jsou lineárně závislé.*

Množina vektorů $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n\}$ se nazývá lineárně nezávislá, pokud není lineárně závislá.

Pro 2 a více vektorů platí, že jsou lineárně závislé, právě když jeden z vektorů je roven lineární kombinaci ostatních.

Příklad: Prvky $\cos^2 x, \sin^2 x, \cos 2x$ prostoru funkcí \mathcal{F} jsou lineárně závislé, neboť pro libovolné $x \in \mathbb{R}$ platí: $\cos 2x = \cos^2 x + (-1)\sin^2 x$.

Pojmy lineární závislost a nezávislost lze zavést také pro nekonečné množiny.

Definice 7 *Množina vektorů M se nazývá lineárně závislá, pokud v ní existuje konečná podmnožina, která je lineárně závislá.*

Množina vektorů M se nazývá lineárně nezávislá, pokud není lineárně závislá.

Příkladem lineárně nezávislé množiny v \mathcal{P} je množina $\{1, x, x^2, x^3, x^4, \dots\}$.

Definice 8 **Lineární obal** konečné množiny $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n\}$ je množina všech lineárních kombinací těchto vektorů. Lineární obal nekonečné množiny M je sjednocení lineárních obalů všech konečných podmnožin množiny M .

Lineární obal množiny $\{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n\}$ značíme $\langle \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n \rangle$. Lineární obal množiny M značíme $\langle M \rangle$. Je-li M podmnožina vektorového prostoru V , pak $\langle M \rangle$ je nejmenší vektorový prostor obsahující množinu M .

Definice 9 **Báze** vektorového prostoru V je množina $B \subset V$, pro kterou platí:

- (i) B je lineárně nezávislá,
- (ii) $\langle B \rangle = V$.

Věta 2 V každém netriviálním vektorovém prostoru existuje báze. Jsou-li B_1 a B_2 dvě báze vektorového prostoru V , pak jsou obě nekonečné nebo mají stejný počet prvků.

Věta 3 Nechtě vektory $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$ tvoří bázi vektorového prostoru V . Je-li $\vec{x} \in V$ libovolný vektor, pak existuje právě jedna uspořádaná n -tice čísel (c_1, \dots, c_n) taková, že

$$\vec{x} = c_1 \vec{x}_1 + \dots + c_n \vec{x}_n.$$

Definice 10 Čísla c_1, \dots, c_n z předchozí věty se nazývají **souřadnice** vektoru \vec{x} v bázi $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_n$.

Definice 11 **Dimenze** vektorového prostoru V je počet prvků báze tohoto prostoru. Označujeme ji symbolem $\dim V$. Speciální případy:

- Triviální prostor má dimenzi 0.
- Pokud je báze prostoru nekonečná, pak klademe $\dim V = \infty$.

Je-li V vektorový prostor a M je podprostor V , pak $\dim M \leq \dim V$.

Věta 4 Nechtě V je vektorový prostor, jehož dimenze je $\dim V = n$ a $M = \{\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_m\}$. Pak platí:

1. Je-li M lineárně nezávislá, pak $m \leq n$.
2. Je-li $m > n$, pak M je lineárně závislá.
3. Nechtě $m = n$. Pak M je lineárně nezávislá, právě když $\langle M \rangle = V$.

1.4 Lineární zobrazení, matice

Definice 12 Zobrazení f vektorového prostoru V do vektorového prostoru W se nazývá **lineární**, jestliže pro každé $\alpha \in \mathbb{R}$ a $\vec{x}, \vec{y} \in V$ platí:

$$f(\alpha\vec{x} + \vec{y}) = \alpha f(\vec{x}) + f(\vec{y}).$$

Jádrem tohoto zobrazení rozumíme množinu

$$\ker f := \{\vec{x} \in V; f(\vec{x}) = \vec{0}\}.$$

Obraz f je množina

$$\mathcal{R}(f) := f(V).$$

Lineární zobrazení f je prosté právě tehdy, když $\ker f = \{\vec{0}\}$.

Věta 5 Jsou-li vektory $\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k$ lineárně závislé, pak jsou lineárně závislé také vektory $f(\vec{x}_1), \dots, f(\vec{x}_k)$. Pokud je navíc f prosté, pak platí i obrácené tvrzení, tedy

$$\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_k \text{ jsou lineárně závislé} \Leftrightarrow f(\vec{x}_1), \dots, f(\vec{x}_k) \text{ jsou lineárně závislé.}$$

Definice 13 (Reálná) matice typu (m, n) je symbol

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{1,2} & \dots & a_{1,n} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \dots & a_{2,n} \\ & & \vdots & \\ a_{m,1} & a_{m,2} & \dots & a_{m,n} \end{pmatrix} = (a_{ij})_{i=1, \dots, m}^{j=1, \dots, n},$$

kde pro $i = 1, \dots, m$ a $j = 1, \dots, n$ jsou a_{ij} reálná čísla (nazývají se **prvky matice** \mathbf{A}).

Množinu všech matic typu (m, n) budeme značit $\mathbb{R}^{m \times n}$. Definujeme-li sčítání matic a násobení matic reálným číslem po složkách, pak množina $\mathbb{R}^{m \times n}$ je vektorový prostor.

Definice 14 Řekneme, že $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times m}$ je **transponovaná matice** k matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, jestliže

$$\forall i = 1, \dots, m \quad \forall j = 1, \dots, n : a_{ij} = b_{ji}.$$

Píšeme také $\mathbf{B} = \mathbf{A}^\top$.

Definice 15 Řekneme, že matice \mathbf{A} je **symetrická**, jestliže $\mathbf{A} = \mathbf{A}^\top$.

Součin matic $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ a $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times p}$ je matice $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{m \times p}$, jejíž složky splňují:

$$c_{ij} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, p.$$

Násobení matic není komutativní, tj. obecně $\mathbf{AB} \neq \mathbf{BA}$. Pro matice vhodných typů (takových, aby je šlo násobit), platí:

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(\mathbf{BC}) &= (\mathbf{AB})\mathbf{C}, \\ (\mathbf{A} + \mathbf{B})\mathbf{C} &= \mathbf{AC} + \mathbf{BC}, \\ (\alpha\mathbf{A})\mathbf{B} &= \mathbf{A}(\alpha\mathbf{B}) = \alpha(\mathbf{AB}), \quad \alpha \in \mathbb{R}.\end{aligned}$$

Definice 16 Čtvercovou matici $\mathbf{I} = (e_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$ nazýváme **jednotkovou maticí**, jestliže pro její prvky platí: $e_{i,j} = 0$ pro $i \neq j$ a $e_{i,j} = 1$ pro $i = j$.

Definice 17 Řekneme, že $\mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je **inverzní matice** k matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, pokud $\mathbf{AB} = \mathbf{BA} = \mathbf{I}$. Tuto matici značíme symbolem $\mathbf{B} = \mathbf{A}^{-1}$. Pokud existuje \mathbf{A}^{-1} , pak matici \mathbf{A} nazýváme **regulární**. V opačném případě se \mathbf{A} nazývá **singulární matice**.

Definice 18 **Hodnost matice \mathbf{A}** je počet lineárně nezávislých řádků v této matici. Značíme ji $\text{rank } \mathbf{A}$.

Platí také, že hodnost je rovna počtu lineárně nezávislých sloupců, tedy $\text{rank } \mathbf{A}^\top = \text{rank } \mathbf{A}$. Matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulární právě tehdy, když platí: $\text{rank } \mathbf{A} = n$.

Definice 19 **Permutace n prvků** je uspořádaná n -tice čísel $1, 2, \dots, n$ taková, že žádné číslo se v ní neopakuje.

Poznámka: Počet různých permutací n prvků je roven číslu $n!$.

Definice 20 Necht' (i_1, i_2, \dots, i_n) je permutace n prvků. **Počet inverzí** této permutace je počet takových dvojic (i_k, i_l) , pro které platí $i_k > i_l$, a přitom $k < l$.

Definice 21 Pro každou permutaci $\pi = (i_1, \dots, i_n)$ definujeme její **znaménko** $\text{sgn } \pi$ takto:

$$\text{sgn } \pi = \begin{cases} +1 & \text{má-li } \pi \text{ sudý počet inverzí} \\ -1 & \text{má-li } \pi \text{ lichý počet inverzí} \end{cases}$$

Prohozením dvou prvků v permutaci způsobí změnu jejího znaménka.

Definice 22 Necht' $\mathbf{A} = (a_{i,j}) \in \mathbb{R}^{n \times n}$. **Determinant matice \mathbf{A}** je číslo

$$\det \mathbf{A} = \sum_{\pi=(i_1, i_2, \dots, i_n)} (\text{sgn } \pi) a_{1, i_1} a_{2, i_2} \cdots a_{n, i_n}.$$

V uvedeném vzorci se sčítá přes všechny permutace n prvků, tj. jedná se o $n!$ sčítanců.

Věta 6 Necht' $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Pak platí:

1. $\det \mathbf{A} = 0$ právě tehdy, když \mathbf{A} je singulární,

2. $\det \mathbf{A}^\top = \det \mathbf{A}$,
3. $\det(\mathbf{AB}) = (\det \mathbf{A})(\det \mathbf{B})$,
4. $\det(\mathbf{A}^{-1}) = 1/\det \mathbf{A}$.
5. Jestliže se \mathbf{B} liší od \mathbf{A} jen prohozením dvojice řádků, pak $\det \mathbf{B} = -\det \mathbf{A}$.
6. Jestliže matice \mathbf{A} má dva stejné řádky, pak $\det \mathbf{A} = 0$.

Definice 23 Číslo $\lambda \in \mathbb{C}$ se nazývá **vlastním číslem** matice $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, jestliže existuje nenulový vektor $\vec{u} \in \mathbb{C}^n$ takový, že

$$\mathbf{A}\vec{u} = \lambda\vec{u}.$$

Vektor \vec{u} se pak nazývá **vlastní vektor** matice \mathbf{A} příslušný vlastnímu číslu λ . Množina všech vlastních čísel \mathbf{A} se nazývá **spektrum** matice \mathbf{A} a značí se $\sigma(\mathbf{A})$.

Číslo λ je vlastním číslem \mathbf{A} právě tehdy, má-li soustava $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$ netriviální řešení, tj. právě tehdy, je-li $\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}$ singulární, což je ekvivalentní podmínce $\det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}) = 0$. Polynom $\chi_{\mathbf{A}}(\lambda) := \det(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})$ se nazývá **charakteristický polynom** matice \mathbf{A} . Číslo λ je tedy vlastním číslem \mathbf{A} , je-li kořenem $\chi_{\mathbf{A}}$. Poznamenejme, že polynom s reálnými koeficienty může mít komplexní kořeny, a reálná matice může proto mít komplexní vlastní čísla. Je-li ovšem reálná matice symetrická, pak jsou všechna její vlastní čísla reálná.

1.5 Soustava lineárních rovnic

V dalším ztotožníme vektory z \mathbb{R}^n s maticemi typu $(n, 1)$, tj. $\vec{a} \in \mathbb{R}^n$ znamená totéž jako $\vec{a} \in \mathbb{R}^{n \times 1}$.

Definice 24 Necht' $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^n$ a $\vec{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^m$. Pak

maticovou rovnost

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$$

nazýváme **soustavou m lineárních rovnic o n neznámých**. Matici \mathbf{A} nazýváme **maticí soustavy** a vektor \vec{b} nazýváme **vektorem pravých stran**. Připíšeme-li k matici soustavy do dalšího sloupce vektor \vec{b} (pro přehlednost oddělený svislou čarou), dostáváme matici $(\mathbf{A}|\vec{b}) \in \mathbb{R}^{m \times (n+1)}$, kterou nazýváme **rozšířenou maticí soustavy**.

Definice 25 Řešením soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ je takový vektor $\vec{a} = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in \mathbb{R}^n$, pro který platí: Dosadíme-li hodnoty α_i za symboly x_i , pak je splněna požadovaná maticová rovnost, tj.

$$\mathbf{A} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{pmatrix}.$$

Řešit soustavu $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ znamená nalézt všechna její řešení, tj. nalézt podmnožinu \mathbb{R}^n všech řešení této soustavy.

Věta 7 (Frobeniova) *Soustava $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ má řešení právě tehdy, když*

$$\text{rank } \mathbf{A} = \text{rank } \mathbf{A}|\vec{b},$$

tj. když hodnota matice soustavy se rovná hodnotě rozšířené matice soustavy.

Definice 26 *Nechť $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ je soustava m lineárních rovnic o n neznámých a $\mathbf{C}\vec{x} = \vec{d}$ je soustava k lineárních rovnic o stejném počtu n neznámých. Říkáme, že tyto soustavy jsou **ekvivalentní**, pokud obě soustavy mají stejné množiny řešení.*

Věta 8 *Ke každé soustavě $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ lze nalézt ekvivalentní soustavu $\mathbf{C}\vec{x} = \vec{d}$, jejíž matice \mathbf{C} je horní trojúhelníková.*

Definice 27 *Existuje-li v matici \vec{b} aspoň jeden prvek nenulový, říkáme, že soustava $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ je **nehomogenní**. Jsou-li všechny prvky v matici \vec{b} nulové, nazýváme soustavu rovnic **homogenní** a zapisujeme ji takto:*

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}.$$

Věta 9 *Množina všech řešení homogenní soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$ s n neznámými tvoří podprostor vektorového prostoru \mathbb{R}^n .*

Věta 10 *Nechť $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$ je homogenní soustava lineárních rovnic o n neznámých. Označme $k := n - \text{rank } \mathbf{A}$. Pak existuje k lineárně nezávislých vektorů $\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k \in \mathbb{R}^n$ takových, že pro množinu M_0 všech řešení soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$ platí:*

$$M_0 = \langle \vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k \rangle.$$

Vektory $\vec{u}_1, \dots, \vec{u}_k$ tvoří jednu z možných bází vektorového prostoru všech řešení M_0 .

Důsledek: Je-li M_0 vektorový prostor všech řešení homogenní soustavy lineárních rovnic $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$ s n neznámými, pak $\dim M_0 = n - \text{rank } \mathbf{A}$.

Definice 28 *Libovolné řešení $\vec{v} \in \mathbb{R}^n$ nehomogenní soustavy lineárních rovnic $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ o n neznámých se nazývá **partikulární řešení** této soustavy.*

*Pokud zaměníme matici \vec{b} za nulovou matici stejného typu, dostáváme homogenní soustavu $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$, kterou nazýváme **přidruženou homogenní soustavou** k soustavě $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$.*

Věta 11 *1. Nechť \vec{v} je partikulární řešení nehomogenní soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ a \vec{u} je libovolné řešení přidružené homogenní soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$. Pak $\vec{v} + \vec{u}$ je také řešením soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$.*

2. Nechť \vec{v} a \vec{w} jsou dvě partikulární řešení nehomogenní soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$. Pak $\vec{v} - \vec{w}$ je řešením přidružené homogenní soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$.

Věta 12 *Nechť \vec{v} je partikulární řešení soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ a M_0 je vektorový prostor všech řešení přidružené homogenní soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{0}$. Pak pro množinu M všech řešení soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ platí:*

$$M = \{\vec{v} + \vec{u}; \vec{u} \in M_0\}.$$

Věta 13 (Cramerovo pravidlo) *Nechť \mathbf{A} je čtvercová regulární matice. Pak pro i -tou složku řešení soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ platí:*

$$\alpha_i = \frac{\det \mathbf{B}_i}{\det \mathbf{A}},$$

kde matice \mathbf{B}_i je shodná s \mathbf{A} až na i -tý sloupec, který je zaměněn za sloupec pravých stran.

2 Iterační metody řešení soustav lineárních rovnic

V této kapitole se budeme zabývat numerickým řešením soustavy

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}.$$

Předpokládáme, že čtenáři je známa Gaussova eliminační metoda, která je příkladem tzv. přímých metod. Její výhodou je univerzálnost — metoda vyřeší v přesné aritmetice soustavu s libovolnou regulární maticí. Nevýhodou je její neefektivita pro velké matice a také to, že v průběhu výpočtu nemá uživatel žádnou informaci o výsledku. Pro úlohy s velkou řídkou maticí \mathbf{A} , se kterými se setkáváme v mnoha praktických problémech, nebo pro úlohy, kde matice není dána explicitně nebo je drahé ji sestavit, může být výhodou použít iterační metody. Tyto metody v zásadě používají jen násobení matic a v průběhu výpočtu postupně vylepšují aproximaci přesného řešení. Konvergence iteračního procesu může být asymptotická nebo v konečném počtu iterací.

Pro detaily ohledně odvození a dalších vlastností iteračních metod odkazujeme na knihu [1].

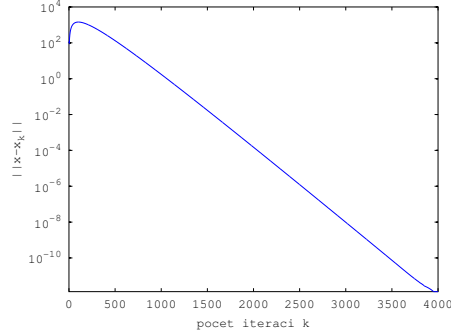
2.1 Klasické iterační metody

Klasické iterační metody jsou založeny na štěpení matice soustavy $\mathbf{A} = \mathbf{M} + \mathbf{N}$ takovém, že matice \mathbf{M} je regulární a snadno invertovatelná a \mathbf{M} a \mathbf{N} jsou zvoleny nějakým vhodným způsobem. Dosazením tohoto štěpení do vztahu $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ dostáváme $(\mathbf{M} + \mathbf{N})\vec{x} = \vec{b}$ a odtud

$$\vec{x} = \mathbf{M}^{-1}(\vec{b} - \mathbf{N}\vec{x}) = \mathbf{M}^{-1}(\vec{b} + \mathbf{M}\vec{x} - \mathbf{A}\vec{x}) = \vec{x} + \mathbf{M}^{-1}(\vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}).$$

Je-li dána počáteční aproximace řešení \vec{x}_0 , můžeme definovat iterační proces následovně:

$$\vec{x}_k = \vec{x}_{k-1} + \mathbf{M}^{-1}(\vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_{k-1}) = (\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A})\vec{x}_{k-1} + \mathbf{M}^{-1}\vec{b}.$$



Obrázek 1: Přechodový jev u klasické iterační metody.

Lze ukázat, že pro chybu aproximace platí odhad

$$\frac{\|\vec{x} - \vec{x}_k\|}{\|\vec{x} - \vec{x}_0\|} \leq \|(\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A})^k\| \leq \|\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\|^k,$$

přičemž pro velká k je $\|(\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A})^k\| \approx \rho(\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A})^k$ (symbolem $\rho(\mathbf{A})$ značíme tzv. spektrální poloměr, který je definován jako $\max\{|\lambda|; \lambda \in \sigma(\mathbf{A})\}$). Vidíme tedy, že metody konvergují k přesnému řešení, pokud $\rho(\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}) < 1$. I v případě, že tato podmínka je splněna, však může být $\|\mathbf{I} - \mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\|^k > 1$ a dochází pak k tzv. přechodovému jevu, kdy chyba aproximace nejprve roste a teprve pak začne klesat (viz obr. 1).

Příklady klasických iteračních metod. Následující metody jsou založeny na štěpení $\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$, kde \mathbf{D} je hlavní diagonála, $-\mathbf{L}$ je striktně dolní trojúhelník matice \mathbf{A} a $-\mathbf{U}$ je striktně horní trojúhelník. Z rovnice

$$(\mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U})\vec{x} = \vec{b}$$

pak lze odvodit jednotlivé metody.

Jacobiova metoda je definována iterací

$$\mathbf{D}\vec{x}_k = \mathbf{L}\vec{x}_{k-1} + \mathbf{U}\vec{x}_{k-1} + \vec{b}.$$

Rozepíšeme-li tento vzorec po složkách (x_i^k značí i -tou složku vektoru \vec{x}_k), dostaneme pro $i = 1, \dots, n$:

$$x_i^k = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1, j \neq i}^n a_{ij} x_j^{k-1} \right).$$

Nevýhodou této metody může být, že v průběhu výpočtu je třeba uchovávat dvě posobě jdoucí aproximace řešení \vec{x}_k, \vec{x}_{k-1} . Metoda **Gauss-Seidelova** se

od předchozí liší v tom, že ihned využívá již spočtené složky vektoru \vec{x}_k , tj. po složkách počítá

$$x_i^k = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^k - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{k-1} \right).$$

Spočtené složky aproximace řešení je tedy možné ihned přepisovat. Maticově lze tuto iteraci zapsat jako

$$\mathbf{D}\vec{x}_k = \mathbf{L}\vec{x}_k + \mathbf{U}\vec{x}_{k-1} + \vec{b}.$$

Z Gauss-Seidelovy metody je odvozena **Superrelaxační metoda** (SOR, successive over-relaxation). Pracuje s relaxačním parametrem $\omega \in [0, 2]$ a je definována vztahem

$$\mathbf{D}\vec{x}_k = \omega(\mathbf{L}\vec{x}_k + \mathbf{U}\vec{x}_{k-1} + \vec{b}) + (1 - \omega)\mathbf{D}\vec{x}_{k-1},$$

tj. kombinuje Gauss-Seidelovu metodu s předchozí iterací.

2.2 Metody Krylovových podprostorů

Důležitá třída iteračních metod je založena na myšlence projektovat soustavu $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ na posloupnost tzv. Krylovových prostorů a tím získávat postupně aproximace řešení.

Definice 29 *Nechť $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\vec{v} \in \mathbb{R}^n$ a $k \leq n$. k -tým Krylovovým prostorem nazýváme podprostor*

$$\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{v}) := \langle \vec{v}, \mathbf{A}\vec{v}, \mathbf{A}^2\vec{v}, \dots, \mathbf{A}^{k-1}\vec{v} \rangle.$$

Metody, které zmíníme v následující části, mají společnou vlastnost tzv. projekčních metod, tj. hledají aproximace ve tvaru

$$\vec{x}_k \in \vec{x}_0 + \mathcal{S}_k, \quad \vec{r}_k \perp \mathcal{C}_k,$$

kde $\vec{r}_k := \vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_k$ je tzv. reziduum a \mathcal{S}_k a \mathcal{C}_k jsou vhodné podprostory. Prostor \mathcal{S}_k je obvykle roven Krylovovu podprostoru $\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0)$, ale jsou možné i jiné volby, např. $\mathbf{A}\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0)$. Volbou prostoru \mathcal{C}_k lze docílit optimality aproximace řešení v tom smyslu, že chyba aproximace $\vec{x} - \vec{x}_k$ je v nějaké normě minimální. Pokud dimenze podprostorů \mathcal{S}_k , \mathcal{C}_k roste, pak pro $k = n$ dostáváme $\mathcal{C}_n = \mathbb{R}^n$ a z podmínky $\vec{r}_k \perp \mathbb{R}^n$ plyne $\vec{r}_n = \vec{0}$, tedy $\vec{x}_n = \vec{x}$ je přesné řešení. Jinak řečeno, rostou-li dimenze prostorů \mathcal{S}_k , \mathcal{C}_k , pak projekční metody najdou řešení systému $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ nejvýše v n krocích.

2.2.1 Metoda sdružených gradientů (CG)

Tato metoda (stručně ji budeme označovat symbolem CG — z anglického *Conjugate gradients*) je určena pro symetrické pozitivně definitní matice.

Definice 30 Matice $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je pozitivně definitní, pokud pro každý nenulový vektor $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ platí:

$$\mathbf{A}\vec{x} \cdot \vec{x} > 0.$$

Výraz

$$\|\vec{x}\|_{\mathbf{A}} := \sqrt{\vec{x} \cdot \mathbf{A}\vec{x}}$$

se nazývá energetická norma nebo také \mathbf{A} -norma. Řekneme, že vektory $\vec{u}, \vec{v} \in \mathbb{R}^n$ jsou navzájem \mathbf{A} -ortogonální, jestliže

$$\vec{u} \cdot \mathbf{A}\vec{v} = 0.$$

Aproximace řešení je v metodě CG konstruována podle vzorce

$$\vec{x}_k := \vec{x}_{k-1} + \gamma_{k-1}\vec{p}_{k-1},$$

kde \vec{p}_{k-1} je směrový vektor a γ_{k-1} je délka kroku. Tyto parametry se určí následujícím způsobem:

- \vec{p}_k volíme ve tvaru $\vec{p}_k := \vec{r}_k + \delta_k\vec{p}_{k-1}$ tak, aby byl \mathbf{A} -ortogonální na \vec{p}_{k-1} , tj. $\vec{p}_k \cdot \mathbf{A}\vec{p}_{k-1} = 0$. Toho docílíme pro

$$\delta_k := \frac{\vec{r}_k \cdot \vec{r}_k}{\vec{r}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}.$$

- γ_{k-1} volíme takové, aby byla minimální energetická norma $\|\vec{x} - \vec{x}_k\|_{\mathbf{A}}$. To nastane právě tehdy, když

$$\gamma_{k-1} := \frac{\vec{r}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}{\vec{p}_{k-1} \cdot \mathbf{A}\vec{p}_{k-1}}.$$

Na základě předchozích vztahů lze ukázat, že CG patří mezi Krylovovské metody, neboť platí:

$$\vec{x}_k \in \vec{x}_0 + \mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0), \quad \vec{r}_k \perp \mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0).$$

Na metodu sdružených gradientů lze také nahlížet jako na metodu, která hledá minimum kvadratického funkcionálu $\frac{1}{2}\vec{x} \cdot \mathbf{A}\vec{x} - \vec{x} \cdot \vec{b}$. Následující algoritmus reprezentuje standardní implementaci metody CG.

Algoritmus A1 Metoda sdružených gradientů

input $\mathbf{A}, \vec{b}, \vec{x}_0$

$\vec{r}_0 := \vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_0$

$\vec{p}_0 := \vec{r}_0$

for $k = 1, 2, \dots$

$$\gamma_{k-1} := \frac{\vec{r}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}{\vec{p}_{k-1} \cdot \mathbf{A}\vec{p}_{k-1}}$$

$$\vec{x}_k := \vec{x}_{k-1} + \gamma_{k-1}\vec{p}_{k-1}$$

$$\vec{r}_k := \vec{r}_{k-1} - \gamma_{k-1}\mathbf{A}\vec{p}_{k-1}$$

$$\delta_k := \frac{\vec{r}_k \cdot \vec{r}_k}{\vec{r}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}$$

$$\vec{p}_k := \vec{r}_k + \delta_k\vec{p}_{k-1}$$

end

Vidíme, že v každé iteraci je třeba provést 1 násobení matice \mathbf{A} s vektorem a v průběhu výpočtu je třeba uchovávat pouze 4 vektory. Metoda CG je tedy velmi efektivní zejména pro velké řídké matice. Je-li matice symetrická pozitivně definitní, pak v přesné aritmetice algoritmus nalezne řešení nejvýše po n iteracích. V praxi ovšem kvůli zaokrouhlovacím chybám dochází ke ztrátě \mathbf{A} -ortogonalit vektorů $\{\vec{p}_k\}$ (resp. ortogonalit vektorů $\{\vec{r}_k\}$), což způsobuje zpoždění konvergence, tedy že i po n krocích je $\vec{x}_n \neq \vec{x}$. Tento nedostatek se někdy odstraňuje tak, že se vektor \vec{r}_k ortogonalizuje proti všem předchozím $\{\vec{r}_i\}_{i=0}^{k-1}$ a proces ortogonalizace se zopakuje vícekrát (obvykle stačí dvakrát).

Nyní si uvedeme, co je známo o rychlosti konvergence metody CG. K tomu potřebujeme znát pojem *číslo podmíněnosti*.

Definice 31 *Nechť \mathbf{A} je symetrická pozitivně definitní matice. Číslo podmíněnosti matice \mathbf{A} je definováno předpisem*

$$\kappa(\mathbf{A}) := \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A})},$$

kde $\lambda_{\max}(\mathbf{A})$, $\lambda_{\min}(\mathbf{A})$ značí největší, resp. nejmenší vlastní číslo matice \mathbf{A} .

Označíme-li $\vec{e}_k := \vec{x}_k - \vec{x}$ chybu k -té aproximace řešení, pak platí následující odhad chyby:

$$\frac{\|\vec{e}_k\|_{\mathbf{A}}}{\|\vec{e}_0\|_{\mathbf{A}}} \leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} + 1} \right)^k.$$

Všimněme si, že číslo v závorce v předchozí nerovnosti je vždy menší než 1. Pokud je $\kappa(\mathbf{A})$ blízké 1, pak odhad chyby říká, že chyba klesá velmi rychle. Pro špatně podmíněné matice (tj. je-li $\kappa(\mathbf{A})$ velké) je číslo v závorce blízké jedné a odhad často nadhodnocuje skutečnou velikost \mathbf{A} -normy chyby. Špatná podmíněnost matice přesto může mít za následek pomalou konvergenci metody. Tuto skutečnost lze řešit pomocí tzv. předpodmínění, které spočívá v tom, že původní soustava $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ se nahradí ekvivalentní soustavou $\hat{\mathbf{A}}\hat{\vec{x}} = \hat{\vec{b}}$ s maticí $\hat{\mathbf{A}}$, která má menší číslo podmíněnosti než \mathbf{A} .

2.2.2 Zobecněná metoda minimálních reziduí (GMRES)

Metodu GMRES (generalized minimal residual method) lze charakterizovat ve smyslu projekčních metod pomocí vztahů

$$\vec{x}_k \in \vec{x}_0 + \mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0), \quad \vec{r}_k \perp \mathbf{A}\mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0).$$

Jak napovídá název, její vlastností je, že v každé iteraci minimalizuje normu rezidua $\|\vec{r}_k\|$. To vede na úlohu nejmenších čtverců, jejíž efektivní implementace je poměrně technicky obtížná. Proto zde její algoritmus neuvádíme. Nepříjemnou vlastností metody GMRES je, že produkuje posloupnost ortogonálních vektorů $\{\vec{v}_k\}$, které je třeba uchovávat, (říkáme, že metoda generuje dlouhé rekurence) a to klade vysoké nároky na paměť. Za tuto cenu ovšem metoda dokáže řešit soustavu s libovolnou regulární maticí.

Stejně jako u metody CG, vlivem zaokrouhlovacích chyb dochází ke zpomalení konvergence kvůli ztrátě ortogonalitě systému $\{\vec{v}_k\}$. I u GMRES tedy obvykle provádíme vícenásobnou ortogonalizaci. Problém s pamětovou náročností se obvykle řeší pomocí tzv. restartu — program uchovává místo celé posloupnosti jen posledních m vektorů $\{\vec{v}_i\}_{i=k-m+1}^k$.

2.2.3 Metoda bikonjugovaných gradientů (BiCG)

Posledním a často používaným příkladem krylovovské metody je metoda BiCG, jež na rozdíl od předchozích dvou řeší zároveň dvě soustavy $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ a $\mathbf{A}^\top \vec{y} = \vec{c}$. Označíme-li $\vec{s}_k := \vec{c} - \mathbf{A}^\top \vec{y}_k$, pak je metoda BiCG charakterizována vztahy

$$\vec{x}_k \in \vec{x}_0 + \mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0), \quad \vec{r}_k \perp \mathcal{K}_k(\mathbf{A}^\top, \vec{s}_0),$$

$$\vec{y}_k \in \vec{y}_0 + \mathcal{K}_k(\mathbf{A}^\top, \vec{s}_0), \quad \vec{s}_k \perp \mathcal{K}_k(\mathbf{A}, \vec{r}_0).$$

Vektory $\{\vec{r}_k\}$ a $\{\vec{s}_k\}$ jsou navzájem biortogonální: $\vec{s}_i \cdot \vec{r}_j = 0$ pro $i \neq j$.

Algoritmus A2 Metoda bikonjugovaných gradientů (BiCG)

```

input  $\mathbf{A}$ ,  $\vec{b}$ ,  $\vec{c}$ ,  $\vec{x}_0$ ,  $\vec{y}_0$ 
 $\vec{r}_0 := \vec{p}_0 := \vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_0$ 
 $\vec{s}_0 := \vec{q}_0 := \vec{c} - \mathbf{A}^\top \vec{y}_0$ 
for  $k = 1, 2, \dots$ 
     $\gamma_{k-1} := \frac{\vec{s}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}{\vec{q}_{k-1} \cdot \mathbf{A}\vec{p}_{k-1}}$ 
     $\vec{x}_k := \vec{x}_{k-1} + \gamma_{k-1} \vec{p}_{k-1}$ 
     $\vec{r}_k := \vec{r}_{k-1} - \gamma_{k-1} \mathbf{A}\vec{p}_{k-1}$ 
     $\vec{y}_k := \vec{y}_{k-1} + \gamma_{k-1} \vec{q}_{k-1}$ 
     $\vec{r}_k := \vec{s}_{k-1} - \gamma_{k-1} \mathbf{A}^\top \vec{q}_{k-1}$ 
     $\delta_k := \frac{\vec{s}_k \cdot \vec{r}_k}{\vec{s}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}$ 
     $\vec{p}_k := \vec{r}_k + \delta_k \vec{p}_{k-1}$ 
     $\vec{q}_k := \vec{s}_k + \delta_k \vec{q}_{k-1}$ 
end
```

Metoda generuje krátké rekurence, je tedy pamětově úsporná, a lze ji použít na obecné regulární matice. Na rozdíl od CG a GMRES však není zaručena konvergence BiCG. Je-li totiž matice \mathbf{A} nesymetrická, může dojít k předčasnému zastavení, když $\vec{r}_k \cdot \vec{s}_k = 0$.

2.3 Předpokládání

Jak již bylo zmíněno v odst. 2.2.1, konvergence krylovovských metod úzce souvisí s číslem podmíněnosti matice \mathbf{A} . Ukážeme si myšlenku předpokládání pro metodu CG (u jiných metod lze postupovat obdobně). Nechť \mathbf{C} je libovolná regulární matice. Potom lze soustavu $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ se symetrickou pozitivně definitní maticí zapsat ve tvaru

$$(\mathbf{C}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{C}^{-\top})(\mathbf{C}^\top \vec{x}) = \mathbf{C}^{-1} \vec{b}.$$

Označíme-li $\hat{\mathbf{A}} := \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{C}^{-\top}$, $\hat{\vec{x}} := \mathbf{C}^{\top}\vec{x}$ a $\hat{\vec{b}} := \mathbf{C}^{-1}\vec{b}$, pak novou soustavu můžeme zapsat jako $\hat{\mathbf{A}}\hat{\vec{x}} = \hat{\vec{b}}$, přičemž $\hat{\mathbf{A}}$ je opět symetrická pozitivně definitní. Tuto soustavu lze řešit metodou CG a mezi aproximacemi řešení nové a původní soustavy platí vztah $\vec{x}_k = \mathbf{C}^{-\top}\hat{\vec{x}}_k$. Pro úplnost zde uvádíme algoritmus předpodmíněné metody CG:

Algoritmus A3 Předpodmíněná metoda sdružených gradientů (PCG)

input \mathbf{A} , \vec{b} , \vec{x}_0
 $\vec{r}_0 := \vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_0$
 $\vec{z}_0 := \mathbf{C}^{-\top}\mathbf{C}^{-1}\vec{r}_0$
 $\vec{p}_0 := \vec{z}_0$
for $k = 1, 2, \dots$
 $\hat{\gamma}_{k-1} := \frac{\vec{z}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}{\vec{p}_{k-1} \cdot \mathbf{A}\vec{p}_{k-1}}$
 $\vec{x}_k := \vec{x}_{k-1} + \hat{\gamma}_{k-1}\vec{p}_{k-1}$
 $\vec{r}_k := \vec{r}_{k-1} - \hat{\gamma}_{k-1}\mathbf{A}\vec{p}_{k-1}$
 $\vec{z}_k := \mathbf{C}^{-\top}\mathbf{C}^{-1}\vec{r}_k$
 $\hat{\delta}_k := \frac{\vec{z}_k \cdot \vec{r}_k}{\vec{z}_{k-1} \cdot \vec{r}_{k-1}}$
 $\vec{p}_k := \vec{z}_k + \hat{\delta}_k\vec{p}_{k-1}$
end

Poznamenejme, že v algoritmu nikdy nepočítáme inverzní matici \mathbf{C}^{-1} , ale operaci $\vec{z}_k := \mathbf{C}^{-\top}\mathbf{C}^{-1}\vec{r}_k$ převedeme na řešení dvou soustav

$$\mathbf{C}\vec{y} = \vec{r}_k, \quad \mathbf{C}^{\top}\vec{z}_k = \vec{y}.$$

Aby bylo řešení nové soustavy efektivnější než řešení soustavy původní, je třeba zvolit matici \mathbf{C} podle následujících požadavků:

- Matici \mathbf{C} volíme tak, aby metoda CG konvergovala co nejrychleji. Ideálně $\hat{\mathbf{A}} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{C}^{-\top} \approx \mathbf{I}$.
- Aby nedošlo k výraznému zvýšení náročnosti výpočtu, je potřeba, aby soustavy $\mathbf{C}\vec{y} = \vec{r}_k$ a $\mathbf{C}^{\top}\vec{z}_k = \vec{y}$ byly rychle řešitelné.
- Pokud je matice \mathbf{A} řídká, pak by i \mathbf{C} měla být řídká. Jinak výrazně vzroste paměťové i výpočetní nároky.

Efektivní volba předpodmiňovací matice často vychází z daného (např. fyzikálního) problému nebo z konkrétní struktury matice \mathbf{A} . Mezi používané obecné předpodmiňovací strategie patří např.:

- neúplný Choleského rozklad, který konstruuje dolní trojúhelníkovou matici \mathbf{C} tak, aby $\mathbf{A} \approx \mathbf{C}\mathbf{C}^{\top}$,
- neúplný LU rozklad: $\mathbf{A} \approx \mathbf{L}\mathbf{U}$, kde \mathbf{L} je dolní trojúhelníková a \mathbf{U} je horní trojúhelníková matice. Předpodmíněná soustava pak má tvar

$$(\mathbf{L}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{U}^{-1})(\mathbf{U}\vec{x}) = \mathbf{L}^{-1}\vec{b}.$$

Reference

- [1] J. Duintjer Tebbens, I. Hnětynková, M. Plešinger, Z. Strakoš, and P. Tichý.
Analýza metod pro maticové výpočty. Základní metody. Matfyzpress, 2012.
ISBN 978-80-7378-201-6.