Numerické metody 1

doc. Mgr. Vít Vondrák, Ph.D.

*Vojtěch Zicha**

18. září 2013 – 18. prosince 2013

Obsah

1 Lineární iterační metody

Přednáška 1
9. října 2013

Budeme se zabývat úlohami $Ax = B, A \in \mathbb{R}^{n\times n}, x \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^n$. Předpokládejme, že A je regulární, poté $x = A^{-1}b$.

1.1 definice. **Iterační metoda** je zobrazení $\Phi : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ taková, že $x_{n+1} = \Phi(x_n)$, kde posloupnost (x_n) jsou tzv. **postupné aproximace**.

1.2 definice. Iterační metoda Φ je **konzistentní** se soustavou lineárních rovnic $Ax = b$, jestliže pro $\forall b \in \mathbb{R}^n$ jsou řešení $A\bar{x} = b$ současně i pevným bodem Φ, tj. $\bar{x} = \Phi(\bar{x})$.

1.3 definice. Iterační metoda Φ je **konvergentní** pro libovolné $b \in \mathbb{R}^n$, jestliže

$$\forall x_0 \in \mathbb{R}^n : \lim x_n = \bar{x}$$

1.4 definice. Iterační metoda Φ se nazývá **lineární**, jestliže

$$\Phi(x) = Mx + Nb$$

kde $M, N \in \mathbb{R}^{n\times n}$.

*vojtech@zicha.name

1.5 LEMMA. *Lineární iterační metoda je konzistentní se soustavou $Ax = b$ právě tehdy, když*

$$M = I - NA$$

Důkaz. • Předpokládejme, že metoda je konzistentní. Poté $x = Mx + Nb$ a $Ax = b$.

$$\begin{aligned} x &= A^{-1}b, \\ A^{-1}b &= MA^{-1}b + Nb \\ A^{-1} &= MA^{-1} + N \\ I &= M + NA \\ M &= I - NA \end{aligned}$$

• Z předpokladů víme, že $M = I - NA$. Nechť $\bar{x} = A^{-1}b$.

$$\begin{aligned} M\bar{x} &= I\bar{x} - NA\bar{x} \\ M\bar{x} &= \bar{x} - Nb \\ \bar{x} &= M\bar{x} - Nb \end{aligned}$$

□

1.6 POZNÁMKA. Možné tvary konzistentních metod:

- $x_{n+1} = x_n - N(Ax_n - b)$,
- $W(x_n - x_{n-1}) = Ax_n - b, W = N^{-1}$.

1.7 POZNÁMKA. Označme **chybu n-té aproximace** $e_n = \bar{x} - x_n, \bar{x} = A^{-1}b$. Poté platí $e_n = M^n e_0$.

Důkaz.

$$\begin{aligned} \bar{x} &= M\bar{x} + Nb \\ x_n &= Mx_{n-1} + Nb \\ \bar{x} - x_n &= M(\bar{x} - x_{n-1}) \\ e_n &= Me_{n-1} = M(Me_{n-2}) = \cdots \\ e_n &= Me^n \end{aligned}$$

□

1.8 VĚTA. *Lineární iterační metoda $x_{n+1} = Mx_n + Nb$ je konvergentní právě tehdy, když $\varrho(M) < 1$, kde ϱ je spektrální poloměr matice, tj. $\max_{i=1,\dots,n} \{|\lambda_i|\}$.*

1.9 VĚTA. *Nechť $\|.\|_M$ je maticová norma odpovídající vektorové normě $\|.\|_v$. Je-li $\|M\|_M < 1$, pak je lineární iterační metoda $x_{n+1} = Mx_n = Nb$ konvergentní.*

Důkaz.

$$0 \leq \|e_n\|_v \leq \|M^n e_0\|_v \leq \|M\|_M^n \cdot \|e_0\|_v$$

Tudíž $n \to \infty : \|e_n\| \to 0$. □

1.10 poznámka. Číslo $-\log \varrho(M)$ nazýváme **řád konvergence**.

1.1 *Jacobiho metoda*

Nechť:

$$A = L + D + U \qquad [L]_{ij} = 0, i \leq j \qquad [U]_{ij} = 0, i \geq j \qquad [D]_{ij} = 0, i \neq j$$

poté zavádíme lineární iterační metodu zvanou **Jacobiho metoda**:

(1) $M = -D^{-1}(L+U), N = D^{-1}, [D]_{ij} \neq 0.$

1.11 poznámka. Uvažujme i-tou rovnici:

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j &= b_i \\
a_{ii}x_i + \sum_{j=1 \wedge j \neq i}^{n} a_{ij}x_j &= b_i \\
a_{ii}x_i &= -\sum_{j=1 \wedge j \neq i}^{n} a_{ij}x_j + b_i \\
x_i &= -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j=1 \wedge j \neq i}^{n} a_{ij}x_j + \frac{b_i}{a_{ii}} \\
x_{i_{n+1}} &= -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j=1 \wedge j \neq i}^{n} a_{ij}x_{j_n} + \frac{b_i}{a_{ii}}
\end{aligned}$$

1.2 *Gaussova-Seidelova metoda*

1.12 poznámka. Vyjděme z Jacobiho metody:

$$\begin{aligned}
x_i &= -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j=1 \wedge j \neq i}^{n} a_{ij}x_j + \frac{b_i}{a_{ii}} \\
x_{i_{n+1}} &= -\frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_{j_{n+1}} + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_{j_n} \right) + \frac{b_i}{a_i i}
\end{aligned}$$

Tento předpis poté definuje lineární iterační metodu zvanou **Gaussova-Seidelova metoda**:

(2) $M = -(D+L)^{-1}U, N = (D+L)^{-1}$

1.3 *Successive over-relaxation (SOR)*

1.13 POZNÁMKA. Upravme Gauss-Seidelovu metodu:

$$x_i = -\frac{1}{a_{ii}} \sum_{j=1 \wedge j \neq i}^{n} a_{ij} x_j + \frac{b_i}{a_{ii}}$$

$$x_{i n+1} = (1-\omega) x_{i n} + \omega \left(\frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_{j_{n+1}} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_{j_n}}{a_i i} \right), 0 \leq \omega \leq 2$$

Následující předpis poté definuje lineární iterační metodu zvanou **Successive over-relaxation**:

(3) $$M = -(D+\omega L)^{-1}(\omega U + (1-\omega)D), N = \omega(D+\omega L)^{-1}$$

Hledáme poté takové ω, aby řád konvergence byl co nejmenší. ref

2 Výpočet vlastních čísel a vlastích vektorů

2.1 DEFINICE. Nechť $A \in \mathbb{R}^{n,n}$. Poté $\lambda \in \mathbb{C}$ a $v \in \mathbb{C}^n$ nazveme **vlastní číslo** a příslušný **vlastní vektor** lineárního zobrazení A, pokud

$$Av = \lambda v$$

2.2 DEFINICE. Pod pojmem **charakteristický polynom** matice A nazveme polynom

$$p(\lambda) = \det(A - I\lambda).$$

. Pod pojmem **charakteristická rovnice** matice A nazveme rovnici

$$p(\lambda) = 0.$$

2.1 *Krylova metoda*

2.3 VĚTA (Cayley-Hamilton). *Platí, že* $p(A) = 0$.

$$\begin{aligned} p(\lambda) = \lambda^n + \sum_{i=0}^{n-1} b_i \cdot \lambda_i &= 0 \\ A^n + \sum_{i=0}^{n-1} b_i \cdot A^i &= 0 \\ A^n y + \sum_{i=0}^{n-1} b_i \cdot A^i y &= 0 \\ \begin{bmatrix} A^0 y & , \dots & , A^{n-1} y \end{bmatrix} b &= -A^n y \\ \tilde{A} b &= \tilde{p} \end{aligned}$$

2.4 PŘÍKLAD. Sestavte charakteristický polynom matice $A = \begin{bmatrix} 10 & 1 & 1 & 2 \\ 1 & 5 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & -5 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & -10 \end{bmatrix}$.

$$A^0 y = y$$

$$Ay = \begin{bmatrix} 10 \\ 1 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

$$A^2 y = A(Ay) = \begin{bmatrix} 106 \\ 16 \\ 6 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$A^3 y = A(A(y)) = \begin{bmatrix} 1022 \\ 192 \\ 92 \\ 212 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} 1 & 10 & 106 & 1082 \\ 0 & 1 & 16 & 192 \\ 0 & 1 & 6 & 92 \\ 0 & 2 & 0 & 212 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2684 \\ -22 \\ -132 \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$p(\lambda) = \lambda^4 - 132\lambda^2 - 22\lambda + 2684$$

2.2 *Charakteristický polynom třídiagonálních matic*

$$T_n = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & \dots & & & 0 \\ c_1 & a_2 & b_2 & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & c_{n-2} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & & & & c_{n-1} & a_n \end{bmatrix}$$

$$p_n(\lambda) = \det(T_n - \lambda I) = (a_n - \lambda)\, p_{n-1}(\lambda) - b_{n-1} c_{n-1} p_{n-2}(\lambda)\, p_0(\lambda) = 1 p_1(\lambda) = a_1 - \lambda$$

2.5 příklad. Určete charakteristický polynom matice $A = \begin{bmatrix} 1 & -3 & 0 & 0 \\ 4 & 2 & -2 & 0 \\ 0 & 5 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$.

$$
\begin{aligned}
p_0(\lambda) &= 1 \\
p_1(\lambda) &= 1 - \lambda \\
p_2(\lambda) &= (2-\lambda)(1-\lambda) + 12 = \lambda^2 - 3\lambda + 14 \\
p_3(\lambda) &= (3-\lambda)(\lambda^2 - 3\lambda + 14) + 10(1-\lambda) = -\lambda^3 + 6\lambda^2 - 33\lambda + 52 \\
p_4(\lambda) &= (2-\lambda)(-\lambda^3 + 6\lambda^2 - 33\lambda + 52) =
\end{aligned}
$$

2.3 *Výpočet dominantního vlastního čísla*

2.6 definice. Přepokládejme, že $|\lambda_1| \geq |\lambda_1| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$. Poté λ_1 nazýváme **dominantním vlastním číslem**.

Mocninná metoda

Nechť $A \in \mathbb{R}^n, \sigma(A)$, a množina vlastních vektorů $\{x_1, \ldots, x_n\}$ přísluší vlastním číslům $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n\}$. Poté $\forall v_0 \in \mathbb{R}^n : \exists! \alpha_i \in \mathbb{R} : v_0 = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i$. Nechť $v_0 \in \mathbb{R}^n$ takové, že $\langle v_0, x_1 \rangle \neq 0$. Poté konstruujme iterační proces $v_{k+1} = Av_k$.

2.7 definice. Nechť $y \in \mathbb{R}^n$ je takové, že $\langle y, x_1 \rangle \neq 0$. Poté číslo $\sigma_k := \langle y, v_k \rangle$ nazveme **Schwartzova konstanta**.

2.8 věta. *Podíl Schwartzových konstant konverguje k dominantnímu vlastnímu číslu* ($\lim \frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} = \lambda_1$).

Důkaz.

$$
\begin{aligned}
v_{k+1} &= A^{k+1} v_0 \\
v_{k+1} &= A^{k+1} \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i = \sum_{i=1}^n \alpha_i A^{k+1} x_i \\
v_{k+1} &= \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^{k+1} x_i \\
\frac{\sigma_{k+1}}{\sigma_k} &= \frac{\langle y, v_{k+1} \rangle}{y, v_k} = \frac{\left\langle g, \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^{k+1} x_i \right\rangle}{\left\langle y, \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k x_i \right\rangle} \\
&\ldots
\end{aligned}
$$

□

2.9 věta (o posunu spektra). *Nechť λ je vlastní číslo A a v je odpovídající vlastní vektor. Poté $A - qI, q \in \mathbb{R}$ má vlastní číslo $\lambda - q$ a odpovídající vektor v.*

Důkaz.

$$(A - qI)v = Av - qv = \lambda v - qv = (\lambda - q)\, v$$

□

2.4 *Metody založené na podobnosti matic*

Nechť $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ je symetrická matice.

2.10 definice. Nechť $A, B \in \mathbb{R}^{n,n}$ jsou podobné, pokud existuje regulární matice $T \in \mathbb{R}^{n,n}$ a platí

$$A = TBT^-1.$$

2.11 věta. *Podobné matice mají stejné spektrum (stejná vlastní čísla).*

Důkaz. Nechť λ je vlastní číslo matice A a v je odpovídající vlastní vektor.

$$\begin{aligned} Av &= \lambda v \\ TBT^-1v &= \lambda v \\ BT^-1v &= \lambda T^-1v \\ Bw &= \lambda w \end{aligned}$$

□

2.12 definice. Řekneme, že matice $Q \in \mathbb{R}^{n,n}$ je ortogonální, pokud

$$Q^-1 = Q^T.$$

2.13 věta. *Q má lineárně nezávislé řádky (resp. sloupce), tvořící ortonormální bázi.*

Důkaz.

$$I = Q^TQ = \begin{bmatrix} s_1^T \\ \cdots \\ s_n^T \end{bmatrix} \begin{bmatrix} s_1, \dots, s_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_1^Ts_1 & \cdots & s_1^Ts_n \\ \dots & \ddots & \dots \\ s_1^Ts_1 & \cdots & s_n^Ts_n \end{bmatrix} \forall i, j = 1, \dots, n : s_i^Ts_j = \begin{Bmatrix} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{Bmatrix}$$

□

QR algoritmus

2.14 věta. *Nechť $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ je regulární. Pak existuje horní trojúhelníková matice $R \in \mathbb{R}^{n,n}$ a ortogonální matice $Q \in \mathbb{R}^{n,n}$ takové, že:*

$$A = QR.$$

Důkaz.

$$
\begin{aligned}
\tilde{s_1} &:= s_1^A, s_1^Q = \frac{\tilde{s_1}}{\|\tilde{s_1}\|} \\
\tilde{s_k} &:= s_{k-1}^A + \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_{i,k} s_i^Q, s_k^Q = \frac{\tilde{s_k}}{\|\tilde{s_k}\|} \\
\alpha_{j,k} &= -\frac{\left\langle s_j^Q, \tilde{s_j} \right\rangle}{\left\langle s_k^A, \tilde{s_j} \right\rangle} = -\frac{\left\langle s_j^Q, s_j^Q \right\rangle}{\left\langle s_k^A, s_j^Q \right\rangle} \\
s_1^A &= \|\tilde{s_1}\| \, s_1^Q \\
s_k^A &= \|\tilde{s_k}\| \, s_k^Q - \sum_{i=1}^{k-1} \alpha_{i,k} s_i^Q
\end{aligned}
$$

$$
A^T = \begin{bmatrix} {s_1^A}^T \\ \dots \\ {s_n^A}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|\tilde{s_1}\| & 0 & \cdots & 0 \\ \dots & \ddots & & \dots \\ -\alpha_{1,n} & \cdots & -\alpha_{n-1,n} & \|\tilde{s_n}\| \end{bmatrix} \begin{bmatrix} {s_1^A}^T \\ \dots \\ {s_n^A}^T \end{bmatrix} = R^T Q^T \Rightarrow QR = A
$$

□

2.15 VĚTA. *Nechť $A \in \mathbb{R}^{n,n}$ je symetrická pozitivně definitní matice a posloupnost matic (A_k) je definovaná $A_0 = A$, $A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k = R_k Q_k$, kde $A_k = Q_k R_k$. Pak*

$$\lim A_k = D,$$

kde D má na diagonále vlastní čísla.

Givensovy rotace

Hledáme třídiagonální matici $T = Q^T A Q$ pomocí otočení $Q = R_1 \cdots R_m$, kde $R_{i,j}^{\varphi} = \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{bmatrix}$.

Matice $R_{p,q,r}$ nuluje prvek na pozici $[A]_{q,r}$ se změnou řádku p, q. Pro prvky platí

$$
\begin{aligned}
0 &= \sin\varphi \cdot A_p r + \cos\varphi \cdot A_p r \\
\sin\varphi &= -\frac{A_{qr}}{\sqrt{A_{pr}^2 + A_{qr}^2}} \\
\cos\varphi &= \frac{A_{pr}}{\sqrt{A_{pr}^2 + A_{qr}^2}}
\end{aligned}
$$

Lanczosova metoda

Hledáme symetrickou třídiagonální matici T pomocí posloupnosti podobnostních transformací $T = Q^T AQ$, kde Q je ortogonální maticí.

$$
\begin{aligned}
\left[s_1^Q, \quad \cdots, \quad s_n^Q\right] T &= A \left[s_1^Q, \quad \cdots, \quad s_n^Q\right] \\
s_{k-1}^Q b_{k-1} + s_k^Q + s_{k+1}^Q b_k &= A s_k^Q \\
\left\langle s_k^Q, s_{k-1}^Q \right\rangle b_{k-1} + \left\langle s_k^Q, s_k^Q \right\rangle a_k + \left\langle s_k^Q, s_{k+1}^Q \right\rangle b_k &= \left\langle s_k^Q, A s_k^Q \right\rangle \\
a_k &= \left\langle A s_k^Q, s_k^Q \right\rangle \\
\left\langle s_{k+1}^Q, s_{k-1}^Q \right\rangle b_{k-1} + \left\langle s_{k+1}^Q, s_k^Q \right\rangle a_k + \left\langle s_{k+1}^Q, s_{k+1}^Q \right\rangle b_k &= \left\langle s_{k+1}^Q, A s_k^Q \right\rangle \\
b_k &= \left\langle A s_k^Q, s_{k+1}^Q \right\rangle \\
\left\langle s_k^Q, s_{k-1}^Q \right\rangle b_{k-1} + \left\langle s_k^Q, s_k^Q \right\rangle a_k + \left\langle s_k^Q, s_{k+1}^Q \right\rangle b_k &= \left\langle s_k^Q, A s_k^Q \right\rangle \\
a_k &= \left\langle A s_k^Q, s_k^Q \right\rangle \\
s_{k+1}^Q &= \frac{1}{b_k} \left((A - a_k I) s_k^Q - b_{k-1} s_{k-1} Q \right) = \frac{r_k}{\|r_k\|} \\
r_k &= (A - a_k I) s_k^Q - b_{k-1} s_{k-1} Q
\end{aligned}
$$