MATEMATIKA 3

Dana Černá

http://kmd.fp.tul.cz

Katedra matematiky a didaktiky matematiky

Technická univerzita v Liberci

PŘÍMÉ METODY PRO ŘEŠENÍ SOUSTAV LINEÁRNÍCH ALGEBRAICKÝCH ROVNIC

- Základní pojmy numerické lineární algebry
- Gaussova eliminace
- LU rozklad
- Choleského rozklad

METODY ŘEŠENÍ SOUSTAV LINEÁRNÍCH ALGEBRAICKÝCH ROVNIC

Budeme uvažovat soustavu n rovnic s n neznámými:

$$\begin{array}{ccccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \dots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 \\ \vdots & & & & & & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \dots & + & a_{nn}x_n & = & b_n \end{array}$$

Soustavu lze zapsat v maticovém tvaru $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, kde

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \mathbf{b} := \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}, \mathbf{x} := \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}$$

Matice $\mathbf{A}$ se nazývá matice soustavy, vektor $\mathbf{b}$ se nazývá vektor pravé strany. Vektor $\mathbf{x}$ se nazývá vektor neznámých.

Definujme matici:

$$\mathbf{A_b} := \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

Tato matice se nazývá rozšířená matice soustavy.
Matice soustavy, která má mnohem více nulových prvků než nenulových prvků se nazývá řídká. Matice, která není řídká se nazývá hustá nebo plná.

l^p - norma vektoru $\mathbf{v} = (v_1, \dots, v_n) \in \mathbb{R}^n$ je definována:

$$\|\mathbf{v}\|_p = \begin{cases} \left(\sum_{k=1}^n |v_k|^p\right)^{1/p} & \text{pro } p \in \mathbb{N}, \\ \max\limits_{k=1,\dots,n} |v_k| & \text{pro } p = \infty. \end{cases}$$

Pro matici $\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^{n} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ budeme definovat její p-normu:

$$\|\mathbf{A}\|_p = \max_{\mathbf{v} \neq 0} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{v}\|_p}{\|\mathbf{v}\|_p}$$

a Frobeniovu (Schurovu) normu:

$$\|\mathbf{A}\|_F = \left(\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2 \right)^{1/2} .$$

Spektrální poloměr matice $\mathbf{A}$ je definován:

$$\rho(\mathbf{A}) = \max \{ |\lambda| : \lambda \ \text{ je vlastní číslo matice } \mathbf{A} \} .$$

Věta: Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ a libovolnou normu matice $\|\cdot\|$ platí $\rho(\mathbf{A}) \leq \|\mathbf{A}\|$.

Věta: Pro každou matici $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ platí
a) $\|\mathbf{A}\|_1 = \max_{1 \leq j \leq n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|$
b) $\|\mathbf{A}\|_\infty = \max_{1 \leq i \leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|$
c) $\|\mathbf{A}\|_2 = \sqrt{\rho(\mathbf{A}^T \mathbf{A})}$
d) Je-li matice $\mathbf{A}$ symetrická, potom $\|\mathbf{A}\|_2 = \rho(\mathbf{A})$.

Norma $\|\cdot\|_2$ se nazývá Euklidovská nebo také spektrální norma.

PODMÍNĚNOST MATICE

Příklad:

a) Soustava
$$\begin{array}{rcrcl} x & + & y & = & 2 \\ x & + & 1.00000001y & = & 2.00000001 \end{array}$$

má řešení $x = 1,\ y = 1$.

b) Soustava
$$\begin{array}{rcrcl} x & + & y & = & 2 \\ x & + & 1.00000001y & = & 2.00000002 \end{array}$$

má řešení $x = 0,\ y = 2$.

c) Soustava
$$\begin{array}{rcrcl} x & + & y & = & 2 \\ x & + & y & = & 2 \end{array}$$

má nekonečně mnoho řešení $x = t,\ y = 2 - t,\ t \in \mathbb{R}$.

Chyby v zadání matice nebo vektoru pravé strany mohou způsobit velké chyby v řešení.

Věta: O PODMÍNĚNOSTI MATICE

Předpokládejme, že $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulární matice a $\Delta\mathbf{A}$ je matice taková, že $\left\|\mathbf{A}^{-1}\Delta\mathbf{A}\right\|_2 < 1$. Potom platí

$$\frac{\left\|\mathbf{x}^{\Delta} - \mathbf{x}^*\right\|_2}{\|\mathbf{x}^*\|_2} \leq \frac{\|\mathbf{A}\|_2 \left\|\mathbf{A}^{-1}\right\|_2}{1 - \|\mathbf{A}^{-1}\Delta\mathbf{A}\|_2} \left(\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|_2}{\|\mathbf{A}\|_2} + \frac{\|\Delta\mathbf{b}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2}\right),$$

kde $\mathbf{x}^*$ je řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $\mathbf{x}^{\Delta}$ je řešení soustavy $(\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A})\,\mathbf{x} = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$.

Jestliže relativně malé změny prvků matice nebo prvků vektoru pravé strany způsobí relativně velké změny v řešení, nazývá se matice špatně podmíněná, jinak se matice nazývá dobře podmíněná. Podmíněnost charakterizuje číslo podmíněnosti matice **A**, které je definováno:

$$cond\,(\mathbf{A}) := \|\mathbf{A}\|_2 \left\|\mathbf{A}^{-1}\right\|_2 .$$

Platí $cond(A) \geq 1$. Pokud je $cond(A)$ velké, je matice **A** špatně podmíněná.

METODY ŘEŠENÍ SOUSTAV LINEÁRNÍCH ALGEBRAICKÝCH ROVNIC

- Přímé - Teoreticky přesné řešení získáme po konečně mnoha krocích. Jsou vhodné pro malé plné matice, za určitých podmínek také pro velké řídké matice.
- Iterační - Počítáme posloupnost vektorů, která konverguje k přesnému řešení. Používají se soustavy s velkými řídkými maticemi.

PŘÍMÉ METODY

- Gaussova eliminace
- LU rozklad
- Choleského rozklad

1. GAUSSOVA ELIMINACE

Přímý chod:

for $k = 1, \dots, n-1$
    for $i = k+1, \dots, n$
        $a_{ik} := \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$
        for $j = k+1, \dots, n$
            $a_{ij} := a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$
        end
        $b_i := b_i - a_{ik} b_k$
    end
end

Zpětný chod:

for $i = n, \dots, 1$
    $x_i := \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j \right)$
end

Gaussova eliminace je pro obecné matice numericky nestabilní. Proto se provádí Gaussova eliminace s pivotací.

Prvek a_{kk}, který je v k-tém kroku Gaussovy eliminace na pozici (k, k) a kterým dělíme, se nazývá pivot. Pokud je tento prvek malý ve srovnání s ostaními prvky, může dojít k velkým zaokrouhlovacím chybám. Proto provedeme pivotaci, tedy mezi prvky na pozicích $(k, k), \ldots, (n, k)$ nalezneme prvek, který je v absolutní hodnotě největší. Řádek s tímto prvkem vyměníme s k-tým řádkem. Tento proces se nazývá *částečná* nebo také *sloupcová pivotace*.

Gaussova eliminace, vyžaduje $\mathcal{O}\left(n^3\right)$, přesněji $\frac{2n^3}{3} + \mathcal{O}\left(n^2\right)$, operací s plovoucí řádovou čárkou.

Třídiagonální matice je matice, kde $a_{ij} = 0$ pro $|i - j| > 1$.

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} s_1 & t_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ r_2 & s_2 & t_2 & 0 & & 0 \\ 0 & r_3 & s_3 & t_3 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ 0 & & 0 & r_{n-1} & s_{n-1} & t_{n-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & r_n & s_n \end{pmatrix}$$

Gaussova eliminace pro třídiagonální matice vyžaduje pouze $\mathcal{O}(n)$ operací s plovoucí řádovou čárkou.

Gaussova eliminace je vhodná pro řešení soustav s malými plnými maticemi.

Gaussova eliminace je vhodná také pro určité typy velkých řídkých matic, např. pro třídiagonální matice.

U obecných velkých řídkých matic je třeba dbát na to, aby nedocházelo k zaplnění matice, tj. aby z nulových prvků nevznikaly nenulové.

2. LU ROZKLAD

Matici soustavy $\mathbf{A}$ rozložíme na součin $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$, kde matice $\mathbf{L}$ je dolní trojúhelníková matice s jedničkami na diagonále a $\mathbf{U}$ je horní trojúhelníková matice. Matici $\mathbf{U}$ získáme pomocí Gaussovy eliminace, matice $\mathbf{L}$ obsahuje koeficienty (s opačným znaménkem), kterými násobíme řádky při eliminaci.

Soustavu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ můžeme zapsat ve tvaru $\mathbf{LUx} = \mathbf{b}$. Označme $\mathbf{y} := \mathbf{Ux}$. Potom řešení soustavy pomocí LU-rozkladu spočívá v řešení dvou trojúhelníkových soustav: $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ a $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$.

Příklad LU rozkladu:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 0 & 2 \\ 2 & 2 & 5 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}}$$

Odvození: Odečtení $l_{j,i}$ násobku j-tého řádku od i-tého řádku matice $\mathbf{A}$ lze reprezentovat vynásobením matice $\mathbf{A}$ maticí $\mathbf{L}_{j,i}$, kde

$$
\begin{array}{ccc}
 & \begin{array}{c} i - t\acute{y} sloupec \\ \downarrow \end{array} & \\
\mathrm{L}_{j,i} := &
\begin{pmatrix}
1 & 0 & 0 & 0 & \dots & & \dots & 0 & 0 \\
0 & 1 & 0 & 0 & \dots & & \dots & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & 0 & \dots & & \dots & 0 & 0 \\
\vdots & & & \ddots & & & & & \vdots \\
0 & & -l_{j,i} & & & 1 & \dots & 0 & 0 \\
\vdots & & & & & & \ddots & & \vdots \\
0 & 0 & \dots & & & & \dots & 1 & 0 \\
0 & 0 & \dots & & & & \dots & 0 & 1
\end{pmatrix}
&
\begin{array}{l}
\\ \\ \\ \\ \leftarrow j - t\acute{y}\ \check{r}\acute{a}dek \\ \\ \\ \\
\end{array}
\end{array}
$$

Potom

$$
\begin{aligned}
\mathbf{L}_{j,i}\mathbf{A} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \dots & & 0 \\ 0 & 1 & & & & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & \dots & -l_{j,i} & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{j,1} & a_{j,2} & \dots & a_{j,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{j,1} - l_{j,i}a_{i,1} & a_{j,2} - l_{j,i}a_{i,2} & \dots & a_{j,n} - l_{j,i}a_{i,n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}.
\end{aligned}
$$

Koeficient $l_{j,i}$ zvolíme tak, aby po vynásobení maticí $\mathbf{L}_{j,i}$ byla ve výsledné matici na pozici (j, i) nula. Dostaneme

$$\mathbf{L}_{n,n-1} \dots \mathbf{L}_{3,1} \mathbf{L}_{2,1} \mathbf{A} = \mathbf{U},$$

kde $\mathbf{U}$ je horní trojúhelníková matice. Vyjádříme $\mathbf{A}$:

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}_{2,1}^{-1} \mathbf{L}_{3,1}^{-1} \dots \mathbf{L}_{n,n-1}^{-1} \mathbf{U},$$

a položíme $\mathbf{L} = \mathbf{L}_{2,1}^{-1} \mathbf{L}_{3,1}^{-1} \dots \mathbf{L}_{n,n-1}^{-1}$. Matice $\mathbf{L}$ má tvar

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & & 0 \\ l_{2,1} & 1 & & & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & 1 & & \\ \vdots & & & & \\ l_{n,1} & l_{n,2} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{pmatrix}$$

a splňuje $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$.

Doolittlův algoritmus:

1. Nalezneme matice **L**, **U** pomocí Gaussovy eliminace.

$u_{11} = a_{11}$
for $i = 1, \ldots, n$
    $l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}$
end
for $k = 2, \ldots, n$
    $u_{1k} = a_{1k}$
    for $i = 2, \ldots, k$:
        $u_{ik} = a_{ik} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} u_{jk}$
    end
    for $i = k+1, \ldots, n$:
        $l_{ik} = \frac{1}{u_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{k-1} l_{ij} u_{jk} \right)$
    end
end

2. Řešíme trojúhelníkovou soustavu $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$.
3. Řešíme trojúhelníkovou soustavu $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$.

Pro obecné matice LU rozklad nemusí existovat. Pro regulární matice je vždy možné změnit pořadí řádků matice tak, aby LU rozklad existoval.

Také LU rozklad většinou provádíme s pivotací. Potom má rozklad tvar $\mathbf{PA} = \mathbf{LU}$, kde $\mathbf{P}$ je permutační matice, tj. matice, která má v každém řádku a sloupci právě jednu jedničku, jinak pouze nuly. Vynásobení permutační matici je ekvivalentní změně pořadí řádků.

Řešení jedné soustavy pomocí LU-rozkladu je podobně časově náročné jako Gaussova eliminace, vyžaduje $\frac{2n^3}{3} + \mathcal{O}\left(n^2\right)$ operací s plovoucí řádovou čárkou.

LU - rozklad je výhodné použít především při řešení více soustav se stejnou maticí a různými pravými stranami. Potom provádíme přímý chod, který má složitost $\mathcal{O}\left(n^3\right)$, pouze jednou a pro každou pravou stranu pak provádíme dvakrát zpětný chod, který vyžaduje pouze $\mathcal{O}\left(n^2\right)$ operací s plovoucí řádovou čárkou.

3. CHOLESKÉHO ROZKLAD

Pokud je matice soustavy $\mathbf{A}$ symetrická pozitivně definitní, potom lze použít Choleského rozklad $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$, kde L je dolní trojúhelníková matice (nyní nepředpokládáme jedničky na diagonále).

Matici $\mathbf{L}$ vypočteme pomocí vzorců:

$$l_{rr} = \left(a_{rr} - \sum_{s=1}^{r-1} l_{rs}^2 \right)^{1/2}, \quad r = 1, \ldots n,$$

$$l_{ir} = \frac{1}{l_{rr}} \left(a_{ir} - \sum_{s=1}^{r-1} l_{rs} l_{is} \right), \quad i = r+1, \ldots n.$$

Potom řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ je ekvivalentní řešení soustav $\mathbf{L}\mathbf{y} = \mathbf{b}$ a $\mathbf{L}^T\mathbf{x} = \mathbf{y}$. Řešení soustavy pomocí Choleského rozkladu vyžaduje asi polovinu času a paměti ve srovnání s Gaussovou eliminací a LU rozkladem.

Odvození:

Pro symetrickou pozitivně definitní matici $\mathbf{A}$ velikosti 3×3 vyjádříme součin $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^T$ po složkách:

$$\begin{pmatrix} a_{1,1} & a_{2,1} & a_{3,1} \\ a_{2,1} & a_{2,2} & a_{3,2} \\ a_{3,1} & a_{3,2} & a_{3,3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{1,1} & 0 & 0 \\ l_{2,1} & l_{2,2} & 0 \\ l_{3,1} & l_{3,2} & l_{3,3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{1,1} & l_{2,1} & l_{3,1} \\ 0 & l_{2,2} & l_{3,2} \\ 0 & 0 & l_{3,3} \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} l_{1,1}^2 & l_{1,1} l_{2,1} & l_{1,1} l_{3,1} \\ l_{1,1} l_{2,1} & l_{2,1}^2 + l_{2,2}^2 & l_{2,1} l_{3,1} + l_{2,2} l_{3,2} \\ l_{1,1} l_{3,1} & l_{2,1} l_{3,1} + l_{2,2} l_{3,2} & l_{3,1}^2 + l_{3,2}^2 + l_{3,3}^2 \end{pmatrix}$$

Dostaneme $l_{1,1} = \sqrt{a_{1,1}}$, $l_{2,1} = \frac{a_{2,1}}{l_{1,1}}$, $l_{2,1} = \frac{a_{2,1}}{l_{1,1}}$, $l_{2,2} = \sqrt{a_{2,2} - l_{2,1}^2}$, $l_{3,2} = \frac{a_{3,2} - l_{2,1} l_{3,1}}{l_{2,2}}$, $l_{3,3} = \sqrt{a_{3,3} - l_{3,1}^2 - l_{3,2}^2}$.

Vzorce pro matici velikosti $n \times n$ odvodíme analogickým postupem.

SROVNÁNÍ SLOŽITOSTI:

Metody pro soustavy s obecnou maticí:

METODA	SLOŽITOST
Gaussova eliminace	$\frac{2n^3}{3} + \mathcal{O}\left(n^2\right)$
Gaussova-Jordanova eliminace	$n^3 + \mathcal{O}\left(n^2\right)$
LU rozklad	$\frac{2n^3}{3} + \mathcal{O}\left(n^2\right)$
Choleského rozklad (pro sym. poz. def.)	$\frac{n^3}{3} + \mathcal{O}\left(n^2\right)$

Metody pro soustavy s třídiagonální maticí:

METODA	SLOŽITOST
Gaussova eliminace	$\mathcal{O}(n)$
LU rozklad	$\mathcal{O}(n)$

ITERAČNÍ METODY:

Maticové iterační metody:

- Jacobiho
- Gaussova-Seidelova
- Superrelaxační metoda

Gradientní iterační metody:

- Metoda sdružených gradientů

MATICOVÉ ITERAČNÍ METODY:

ODVOZENÍ: Soustavu

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

upravíme do tvaru

$$\mathbf{x} = \mathbf{B}\mathbf{x} + \mathbf{c}$$

a definujeme posloupnost vektorů

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}^{i} + \mathbf{c},$$

kde $\mathbf{x}^0$ je zvolený počáteční vektor.

Konstruujeme posloupnost vektorů danou předpisem:
$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{B}\mathbf{x}^i + \mathbf{c}, \quad i = 0, 1, \ldots,$
kde $\mathbf{x}^0$ je zvolený počáteční vektor. Matice $\mathbf{B}$ a vektor $\mathbf{c}$ jsou zvoleny tak, že pro přesné řešení x^* původní soustavy platí
$\mathbf{x}^* = \mathbf{B}\mathbf{x}^* + \mathbf{c}$.

VĚTA: Nutná a postačující podmínka konvergence
Posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ právě tehdy, když $\rho(\mathbf{B}) < 1$.

VĚTA: Postačující podmínka konvergence
Posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, pokud $\|\mathbf{B}\| < 1$ pro libovolnou normu matice $\| \ \|$.

1. JACOBIHO METODA:

Rozložme matici $\mathbf{A}$:
$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{U}$,
kde $\mathbf{D}$ je diagonální matice, $\mathbf{L}$ je dolní trojúhelníková matice s nulami na diagonále a $\mathbf{U}$ je horní trojúhelníková matice s nulami na diagonále. Platí

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{Dx} + (\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow \mathbf{Dx} = -\,(\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x} + \mathbf{b}$$
$$\Leftrightarrow \mathbf{x} = -\mathbf{D}^{-1}\,(\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}.$$

Předpis Jacobiho metody:
$$\mathbf{x}^{i+1} = -\mathbf{D}^{-1}\,(\mathbf{L} + \mathbf{U})\,\mathbf{x}^{i} + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}, \quad i = 0, 1, \ldots,$$

Předpis Jacobiho metody rozepsaný po složkách:
$$x_j^{i+1} = \frac{1}{a_{jj}}\left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}x_k^i - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk}x_k^i\right)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 4 & 2 & 1 \\ 2 & 2 & 5 & 2 \\ 7 & 5 & -3 & 1 \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & 0 & 0 \\ 7 & 5 & -3 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{L}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}_{\mathbf{D}} + \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\mathbf{U}}$$

V tomto případě je tedy iterační matice dána vztahem $\mathbf{B} = -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U})$ a posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení právě tehdy, když $\rho\left(-\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}+\mathbf{U})\right) < 1$.

Tuto podmínku splňují například ostře diagonálně dominantní matice, tj. matice pro kterou platí

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1}^{i-1} |a_{ij}| + \sum_{j=i+1}^{n} |a_{ij}|, \quad i = 1, \ldots, n.$$

2. GAUSSOVA-SEIDELOVA METODA:

Nyní při výpočtu složek vektoru $\mathbf{x}^{i+1}$ použijeme místo složek vektoru $\mathbf{x}^i$ složky vektoru $\mathbf{x}^{i+1}$, pokud již byly vypočteny.

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\mathbf{D} + \mathbf{L})\,\mathbf{x} + \mathbf{U}\mathbf{x} = \mathbf{b} \Leftrightarrow (\mathbf{D} + \mathbf{L})\,\mathbf{x} = -\mathbf{U}\mathbf{x} + \mathbf{b}$$
$$\Leftrightarrow \mathbf{x} = -\left(\mathbf{D} + \mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x} + \left(\mathbf{D} + \mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{b}.$$

Předpis Gaussovy-Seidelovy metody:

$$\mathbf{x}^{i+1} = -\left(\mathbf{D} + \mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x}^i + \left(\mathbf{D} + \mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{b}, \quad i = 0, 1, \dots,$$

Předpis Gaussovy-Seidelovy metody rozepsaný po složkách::

$$x_j^{i+1} = \frac{1}{a_{jj}}\left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}x_k^{i+1} - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk}x_k^i\right)$$

V tomto případě tedy posloupnost $\mathbf{x}^i$ konverguje k přesnému řešení právě tehdy, když $\rho\left(-\left(\mathbf{D}+\mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{U}\right) < 1$. Tuto podmínku splňují ostře diagonálně dominantní matice a také symetrické pozitivně definitní matice.

3. SUPERRELAXAČNÍ METODA:

Pro zrychlení konvergence je možné použít modifikaci Gaussovy-Seidelovy metody, při které konstruujeme posloupnost vektorů podle vzorce:

$$\mathbf{x}^{i+1} = (1-\omega)\,\mathbf{x}^{i} + \omega\tilde{\mathbf{x}}^{i+1},$$

kde

$$\tilde{\mathbf{x}}^{i+1} = -\left(\mathbf{D}+\mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x}^{i} + \left(\mathbf{D}+\mathbf{L}\right)^{-1}\mathbf{b}, \quad i = 0, 1, \ldots .$$

Parametr ω se nazývá relaxační faktor a volí se z intervalu $(0, 2)$, obvykle $\omega \in (1, 2)$. Pro symetrické pozitivně definitní matice soustavy tato volba parametru vede ke konvergenci posloupnosti $\mathbf{x}^{i}$ k řešení. Volbou $\omega = 1$ dostaneme Gaussovu-Seidelovu metodu.

4. METODA SDRUŽENÝCH GRADIENTŮ:

Budeme předpokládat, že matice soustavy $\mathbf{A}$ je symetrická pozitivně definitní. Potom řešení soustavy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ je jediným bodem, ve kterém má funkce

$$F(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{Ax} - \mathbf{x}^T\mathbf{b}$$

minimum.

Posloupnost vektorů $\mathbf{x}^i$ budeme konstruovat tak, že v i-tém kroku zvolíme směr $\mathbf{v}^i$ a určíme číslo α_i tak, aby vektor

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{x}^i + \alpha_i\mathbf{v}^i$$

byl bodem minima funkce F na přímce $\mathbf{x}^i + t\mathbf{v}^i$, $t \in \mathbb{R}$.

Volbou $\mathbf{v}^i$ dostaneme konkrétní metodu. V případě metody sdružených gradientů volíme **A**-ortogonální vektory. To jsou vektory, pro které platí:

$$\left(\mathbf{v}^j\right)^T \mathbf{A}\mathbf{v}^i = 0, \quad i \neq j, \quad \text{a} \quad \left(\mathbf{v}^i\right)^T \mathbf{A}\mathbf{v}^i \neq 0.$$

Vektory konstruujeme postupně pomocí reziduí $\mathbf{r}^i = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^i$:

$$\mathbf{v}^{i+1} = \mathbf{r}^{i+1} + \beta_i \mathbf{v}^i,$$

kde konstanta β_i je zvolena tak, aby byla splněna **A**-ortogonalita vektorů $\mathbf{v}^{i+1}$ a $\mathbf{v}^i$.

Další iterační metody: MINRES, GMRES, BiCG a jejich modifikace

Algoritmus metody sdružených gradientů:

Je dáno: $\mathbf{x}^0$, $\mathbf{A}$ symetrická pozitivně definitní, $\mathbf{b}$.

$\mathbf{r}^0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0$, $\mathbf{v}^0 = \mathbf{r}^0$, $i = 0$

while $\left\|\mathbf{r}^i\right\|_2 > \epsilon$ and $i < maximum\_iteraci$

$$\alpha_i = \frac{\left(\mathbf{r}^i\right)^T \mathbf{v}^i}{\left(\mathbf{v}^i\right)^T \mathbf{A}\mathbf{v}^i}$$

$$\mathbf{x}^{i+1} = \mathbf{x}^i + \alpha_i \mathbf{v}^i$$

$$\mathbf{r}^{i+1} = \mathbf{r}^i - \alpha_i \mathbf{A}\mathbf{v}^i$$

$$\beta_i = \frac{\left(\mathbf{r}^{i+1}\right)^T \mathbf{r}^{i+1}}{\left(\mathbf{r}^i\right)^T \mathbf{r}^i}$$

$$\mathbf{v}^{i+1} = \mathbf{r}^{i+1} + \beta_i \mathbf{v}^i$$

$$i = i + 1$$

end

Rychlost konvergence metody sdružených gradientů je charakterizována odhadem

$$\left\|\mathbf{x}^k - \mathbf{x}^*\right\|_A \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa_2(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa_2(\mathbf{A})} + 1}\right)^k \left\|\mathbf{x}^0 - \mathbf{x}^*\right\|_A,$$

kde $\|\cdot\|_A$ je energetická norma

$$\|\mathbf{x}\|_A = \sqrt{\mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x}}$$

a κ_2 označuje číslo podmíněnosti vzhledem k $\|\cdot\|_2$ normě

$$\kappa_2(\mathbf{A}) = \|\mathbf{A}\|_2 \left\|\mathbf{A}^{-1}\right\|_2.$$

Rychlost konvergence metody sdružených gradientů tedy závisí na čísle podmíněnosti matice soustavy. Konvergenci můžeme urychlit pomocí předpodmínění. Místo úlohy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ budeme řešit úlohu

$$\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}\mathbf{P}^{T}\mathbf{x} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b},$$

tedy

$$\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{x}} = \tilde{\mathbf{b}},$$

kde

$$\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}, \quad \tilde{\mathbf{x}} = \mathbf{P}^{T}\mathbf{x}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = \mathbf{P}^{-1}\mathbf{b}.$$

Matice $\mathbf{P}$ se nazývá předpodmiňovač a volíme ji tak, aby byla regulární a aby číslo podmíněnosti matice $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}^{-T}$ bylo menší než číslo podmíněnosti matice $\mathbf{A}$.

Mezi nejjednodušší volbu patří

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \sqrt{a_{11}} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \sqrt{a_{22}} & 0 & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & \dots & 0 & \sqrt{a_{nn}} \end{pmatrix}.$$