FP - SEMINÁŘ Z NUMERICKÉ MATEMATIKY

Dana Černá

http://www.fp.tul.cz/kmd/

Katedra matematiky a didaktiky matematiky

Technická univerzita v Liberci

OBSAH A CÍLE SEMINÁŘE:

- Opakování a procvičení vybraných numerických metod.
- Rozšíření teoretických poznatků pro vybrané numerické metody.
- Implementace numerických metod.
- Paralelní zpracování vybraných numerických úloh.

PODMÍNKY PRO UDĚLENÍ ZÁPOČTU:

- Vypracování vybraných úloh na počítači.

OSNOVA SEMINÁŘE:

- Přímé metody řešení soustav lineárních algebraických rovnic. Gaussova eliminace s vhodnou permutací řádků a sloupců.
- Numerická integrace - Newton-Cotesovy vzorce, Gaussova kvadratura, adaptivní kvadratura. Metoda Monte Carlo.
- Interpolace - Lagrangeova, Hermiteova interpolace. Chyba interpolace. Volba uzlů. Spliny - konstrukce kubických splinů pro různé typy přidaných podmínek. Splinové křivky. Chyba interpolace.
- Řešení nelineárních rovnic a soustav nelineárních rovnic.
- Paralelní zpracování vybraných numerických úloh.

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 $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, 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, že $\lim_{k \to \infty} \mathbf{A}^k = \mathbf{0}$, právě když $\rho(\mathbf{A}) < 1$.

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 a vektoru pravé strany mohou způsobit velké chyby v řešení.

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

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

kde $\mathbf{x}^{*}$ je řešení soustavy $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$, $\mathbf{x}^{\Delta}$ je řešení soustavy $(\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A})\,\mathbf{x} = \mathbf{b} + \Delta\mathbf{b}$ a $\|\cdot\|$ značí normu vektoru a jí odpovídající normu matice.

Jestliže relativně malé změny prvků matice způsobí relativně velké změny v řešení, nazývá se matice špatně podmíněná, jinak se matice nazývá dobře podmíněná. Podmíněnost charakterizuje číslo podmíněnosti matice $\mathbf{A}$, které je definováno:

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

kde $\| \ \|$ je nějaká norma matice, nejčastěji uvažujeme normu $\| \ \|_2$.

Platí $cond(A) \geq 1$. Pokud je $cond(A)$ velké, je matice $\mathbf{A}$ 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 $k = 1, \ldots, n-1$

  for $i = k+1, \ldots, n$

    $a_{ik} := \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$

    for $j = k+1, \ldots, n$

      $a_{ij} := a_{ij} - a_{ik} a_{kj}$

    end

    $b_i := b_i - a_{ik} b_k$

  end

end

Zpětný chod:

for $i = n, \ldots, 1$

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

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:

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

Doolittlův algoritmus:

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

$u_{11} = a_{11}$

for $i = 1, \ldots, n$

$\qquad l_{i1} = \frac{a_{i1}}{u_{11}}$

end

for $k = 2, \ldots, n$

$\qquad u_{1k} = a_{1k}$

$\qquad$ for $i = 1, \ldots, k$:

$\qquad\qquad u_{1k} = a_{1k} - \sum_{j=1}^{i-1} l_{ij} u_{jk}$

$\qquad$ end

$\qquad$ for $i = k+1, \ldots, n$:

$\qquad\qquad l_{ik} = \frac{1}{u_{kk}} \left(a_{ik} - \sum_{j=1}^{r-1} l_{ij} u_{jr} \right)$

$\qquad$ 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 $\mathbf{A} = \mathbf{PLU}$, 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:

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

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

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.

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	$\frac{n^3}{3} + \mathcal{O}\left(n^2\right)$
(pro sym. poz. def.)	

Metody pro soustavy s třídiagonální maticí:

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