

Numerické metody lineární algebry

1 Úvod

1.1 Úlohy lineární algebry

1. Řešení soustav lineárních rovnic $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$

- Řešení soustavy s regulární čtvercovou maticí \mathbf{A} řádu $n \times n$ pro jednu nebo více pravých stran
- Výpočet inverzní matice \mathbf{A}^{-1}
- Výpočet determinantu
- Řešení soustav n rovnic o m neznámých a singulárních $n \times n$ soustav v nějakém definovaném smyslu (1 řešení + báze nulprostoru, řešení s nejmenší normou, řešení ve smyslu nejmenších čtverců)

2. Hledání vlastních čísel a vlastních vektorů

- Úplný problém vlastních čísel
- Částečný problém vlastních čísel

Standardní numerické knihovny - LINPACK (speciální pro řešení soustav lineárních rovnic), EISPACK (speciální pro vlastní čísla a vektory), NAG (obecná), IMSL (obecná)

1.2 Některé základní pojmy a označení

Vektorem zde budeme rozumět sloupcový vektor, horní index T označuje transponovaný vektor (nebo matici), matici označujeme tučným písmem

$$\vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T, \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nm} \end{pmatrix} = (a_{ij}).$$

Pokud nebude uvedeno jinak, budeme uvažovat reálné matice a vektory.

Mírou velikosti vektorů a matic je jejich vektorová norma.

Vektorová norma musí splnit 3 podmínky

- $\|\vec{x}\| \geq 0$ a $\|\vec{x}\| = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0}$,
- $\|\lambda\vec{x}\| = |\lambda|\|\vec{x}\|$,
- $\|\vec{x} + \vec{y}\| \leq \|\vec{x}\| + \|\vec{y}\|$.

Příklady vektorových norem:

- maximová: $\|x\|_I = \max_{i=1, \dots, n} |x_i|$
- součtová: $\|x\|_{II} = \sum_{i=1}^n |x_i|$
- Eukleidovská: $\|x\|_{III} = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$

Maticová norma

Vektorová norma matice se nazývá maticovou normou, pokud navíc platí pro všechny matice \mathbf{A}, \mathbf{B} podmínka d) pro součin matic

$$\|\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\mathbf{B}\|.$$

Maticová norma je souhlasná s vektorovou normou, pokud $\forall \mathbf{A}, \vec{x}$ platí

$$\|\mathbf{A}\vec{x}\| \leq \|\mathbf{A}\| \cdot \|\vec{x}\|$$

Příklady maticových norem:

- řádková: $\|\mathbf{A}\|_I = \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$

- sloupcová: $\|\mathbf{A}\|_{II} = \max_{j=1,\dots,n} \sum_{i=1}^n |a_{ij}|$

- Eukleidovská: $\|\mathbf{A}\|_{III} = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij}^2}$

Každá z uvedených maticových norem je souhlasná se stejně označenou vektorovou normou.

1.3 Metody řešení soustav lineárních rovnic

1. přímé (finitní)
2. iterační
3. gradientní

2 Přímé metody řešení soustav lineárních rovnic

Přímé metody řešení spočívají v úpravě matice na trojúhelníkový (případně diagonální) tvar (*přímý běh*) a potom řešením soustavy s horní trojúhelníkovou maticí \mathbf{U} nebo dolní trojúhelníkovou maticí \mathbf{L} (*zpětný běh*). Zpětný běh je podstatně rychlejší než přímý.

2.1 Řešení soustav s trojúhelníkovou maticí

Rovnice s horní trojúhelníkovou maticí \mathbf{U} se řeší postupným prováděním vzorce ve směru klesajícího indexu k

$$x_k = \frac{1}{u_{kk}} \left(b_k - \sum_{j=k+1}^n u_{kj} x_j \right).$$

K výpočtu libovolného x_k je třeba nejvýše n vnitřních cyklů (1 násobení + 1 sčítání), počet operací roste tedy $\sim n^2$ (přesněji $\simeq 0.5 n^2$ vnitřních cyklů).

2.2 Gaussova a Gauss-Jordanova eliminace

Řeším soustavu rovnic $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$. V prvním kroku nechť prvek $a_{11} \neq 0$ (čehož lze vždy dosáhnout přehozením rovnic). Prvek a_{11} , použitý k úpravě rovnic 2, ..., n nazveme hlavním prvkem (pivot).

Od i -té rovnice odečteme 1. rovnici násobenou multiplifikátorem $m_i^{(1)} = -a_{i1}/a_{11}$. Modifikovaná soustava bude mít v 1. sloupci pod diagonálou samé 0. Úprava prováděná současně s pravou stranou odpovídá násobení rovnice maticí

$$\mathbf{D}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ -a_{21}/a_{11} & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1}/a_{11} & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}.$$

Rovnice po první úpravě má tvar $\mathbf{D}_1\mathbf{A}\vec{x} = \mathbf{D}_1\vec{b}$. Označíme $\mathbf{A}^{(1)} \equiv \mathbf{D}_1\mathbf{A}$ a $\vec{b}^{(1)} \equiv \mathbf{D}_1\vec{b}$.

Po $k - 1$ úpravách má matice $\mathbf{A}^{(k-1)}$ tvar

$$\mathbf{A}^{(k-1)} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1,k-1} & a_{1k} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2,k-1}^{(1)} & a_{2k}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{k-1,k-1}^{(k-2)} & a_{k-1,k}^{(k-2)} & \dots & a_{k-1,n}^{(k-2)} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{kk}^{(k-1)} & \dots & a_{k,n}^{(k-1)} \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{k+1,k}^{(k-1)} & \dots & a_{k+1,n}^{(k-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & a_{nk}^{(k-1)} & \dots & a_{n,n}^{(k-1)} \end{pmatrix}.$$

Zde horní index značí počet úprav daného prvku.

Pokud $a_{kk}^{(k-1)} \neq 0$, lze ho zvolit za hlavní prvek, spočítat multiplikátory $m_i^{(k)} = -a_{ik}^{(k-1)} / a_{kk}^{(k-1)}$ pro $i = k + 1, \dots, n$ a upravit příslušné rovnice.

V k -tém kroku úpravy používám jako hlavní prvek prvek $k - 1$ -krát upravený (odečítání!) hlavní prvek \rightarrow ztráta přesnosti \Rightarrow výběr hlavního prvku.

Bez výběru hlavního prvku jsou přímé metody nepoužitelné pro obecné matice!

Počet operací

Na každou nulu $\leq n$ vnitřních cyklů, potřebuji vynulovat $\frac{1}{2}n(n - 1)$ prvků. Celkový počet vnitřních cyklů $\sim n^3$ (přesněji $\simeq 1/3 n^3$), složitost algoritmu je řádu n^3 .

Gauss-Jordanova eliminace

Upravují se všechny prvky mimo diagonálu. Matice se převede na jednotkovou \mathbf{I} . Přímo spočtu inverzní matici \mathbf{A}^{-1} . Vyšší počet operací $\simeq n^3$ vnitřních cyklů.

2.3 Výběr hlavního prvku (pivoting)

V každém kroku přímého běhu vybíráme hlavní prvek. Z možných prvků vybereme největší v absolutní hodnotě. Malé číslo vzniklo pravděpodobně odečítáním při úpravách, je tedy pravděpodobně zatíženo velkou relativní chybou a proto není jako pivot vhodné.

- *Úplný* výběr hlavního prvku: v celé dosud neupravené části matice hledáme $\max |a_{ij}|$. Pomalý.
- *Částečný* výběr hlavního prvku: v daném sloupci (*sloupcový*) nebo řádku (*řádkový*).
- *Implicitní* výběr hlavního prvku: Rychlejší, vylepšená strategie sloupcového výběru. Při výběru porovnávám velikosti prvků v daném sloupci normované na maximum absolutních hodnot prvků v daném řádku původní matice.

Výběr hlavního prvku \rightarrow použitelnost přímých metod pro většinu matic.

Pro obecné velké matice ($N > 50$) nutná dvojitá přesnost. I tak často problémy u velkých špatně podmíněných matic!

Problémy:

1. Singulární matice
2. Singulární matice vzniklá ztrátou přesnosti při úpravách
3. Ztráta přesnosti

2.4 LU metoda

Každou regulární matici \mathbf{A} lze rozložit do tvaru $\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$, kde \mathbf{L} , \mathbf{U} jsou levá dolní, resp. pravá horní trojúhelníkové matice. Potom řešení najdu postupným řešením 2 soustav s trojúhelníkovou maticí

$$\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b} \Rightarrow (\mathbf{LU})\vec{x} = \vec{b} \Rightarrow \mathbf{L}(\underbrace{\mathbf{U}\vec{x}}_{\vec{y}}) = \vec{b} \Rightarrow \mathbf{L}\vec{y} = \vec{b}, \mathbf{U}\vec{x} = \vec{y}.$$

LU dekompozice

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

Násobení matic

$$\text{pro } i \leq j : \quad a_{ij} = u_{ij} + \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj}$$

$$\text{pro } i > j : \quad a_{ij} = l_{ij}u_{jj} + \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj}$$

Croutův algoritmus - postupný výpočet např. odleva po sloupcích a ve sloupcích odshora. Nejdříve

$$u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}u_{kj} \quad i = 1, \dots, j$$

užívá l z předchozích sloupců a u z předchozích řádků, a potom

$$l_{ij} = \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik}u_{kj} \right) / u_{jj} \quad i = j + 1, \dots, n$$

užívá l z předchozích sloupců a u z naddiagonální části sloupce.

Sloupcové hledání hlavního prvku (úplné nelze).

Prvky a_{ij} použijí jen jednou, výsledné prvky matic \mathbf{L} a \mathbf{U} se vejdou do jedné matice.

Vlastnosti LU metody:

- Přímá (finitní) metoda, stejně kroků jako přímý běh Gaussovy eliminace
- Hlavní výhoda: při dekompozici nepracuji s pravou stranou rovnice, rychlé výpočty pro postupně získávané pravé strany
- Lze iterativně zpřesnit výsledek

2.5 Iterativní zpřesnění řešení

Hledáme řešení \vec{x} lineární rovnice $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$. Získáme nepřesné řešení $\vec{\tilde{x}}$

$$\vec{\tilde{x}} = \vec{x} + \vec{\delta x} \Rightarrow \mathbf{A}(\vec{x} + \vec{\delta x}) = \vec{b} + \vec{\delta b} \Rightarrow \mathbf{A}\vec{\delta x} = \vec{\delta b} = \mathbf{A}\vec{\tilde{x}} - \vec{b}$$

$$\vec{x} = \vec{\tilde{x}} - \vec{\delta x}$$

Označíme \vec{x}_0 nepřesné řešení systému v prvním kroku $\mathbf{A}\vec{x}_0 \simeq \vec{b}$ a pak provádíme iteraci

$$\mathbf{A}(\vec{\delta x})_i = \vec{b} - \mathbf{A}\vec{x}_i,$$

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{x}_i + (\vec{\delta x})_i.$$

2.6 Podmíněnost řešení soustavy lineárních rovnic

Podmíněnost je dána relativní změnou řešení \vec{x} ku relativní změně vstupních dat, což jsou matice \mathbf{A} a pravá strana \vec{b} .

Budeme tedy odhadovat velikost normy $\Delta\vec{x}$ při řešení úlohy

$$(\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A})(\vec{x} + \Delta\vec{x}) = \vec{b} + \Delta\vec{b}.$$

- Nejdříve vyřešíme případ $\Delta\mathbf{A} = 0$:

$$\begin{aligned}\Delta\vec{x} = \mathbf{A}^{-1}\Delta\vec{b} &\Rightarrow \|\Delta\vec{x}\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\|\|\Delta\vec{b}\|, \\ \mathbf{A}\vec{x} = \vec{b} &\Rightarrow \|\vec{x}\| \geq \frac{\|\vec{b}\|}{\|\mathbf{A}\|}.\end{aligned}$$

Pro relativní změnu řešení tedy platí

$$\frac{\|\Delta\vec{x}\|}{\|\vec{x}\|} \leq \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|\frac{\|\Delta\vec{b}\|}{\|\vec{b}\|}.$$

Číslo $C_p = \|\mathbf{A}\|\|\mathbf{A}^{-1}\|$ se nazývá podmíněnost matice.

- Pokud je i $\Delta\mathbf{A} \neq 0$, pak

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

Podmíněnost úlohy řešení lineárních rovnic je dána pouze maticí a vůbec nezávisí na pravé straně.

Pro $C_p \gg 1$ je soustava špatně podmíněná a malé změny vstupních dat vedou k velké změně výsledku. To samozřejmě vede k tomu, že i malé zaokrouhlovací chyby ve výpočtu se projeví velkou chybou výsledku.

2.7 Výpočet inverzní matice a determinantu

Gauss-Jordanova eliminace vypočte přímo inverzní matici. U Gaussovy eliminace a LU dekompozice získáme inverzní matici řešením pro n pravých stran, tvořených vektory standardní báze.

Všechny tři metody jsou rovnocenné jak přesností, tak i počtem n^3 operací. Determinant nepočítáme ze vzorců (růst zaokrouhlovací chyby), ale využijeme věty, že determinant součinu matic je roven součinu determinantů. Pro LU dekompozici

$$\det(\mathbf{A}) = \det(\mathbf{L}) \cdot \det(\mathbf{U}) = \prod_{j=1}^n u_{jj}.$$

Gaussova eliminace odpovídá násobení maticemi a pokud se sám řádek nenásobí a pouze se přičítají násobky jiných řádků, je determinant matice každé úpravy $\mathbf{D}_i = 1$ a determinant \mathbf{A} se rovná součinu diagonálních prvků trojúhelníkové matice.

Pokud dochází k přehazování řádků při výběru hlavních prvků, dojde k násobení determinantu -1 , je nutno si zapamatovat počet změn znaménka.

2.8 Speciální typy matic

- Řídká matice má většinu prvků $= 0$.

Pro řešení soustav s řídkou maticí se často používají gradientní metody, spočívající v minimalizaci vhodného kvadratické formy, např. $\|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}\|_{III}^2$. Pro řídkou matici je totiž počet operací pro výpočet $\mathbf{A}\vec{x} \sim n$, a ne $\sim n^2$ jako pro plnou matici.

- Matice \mathbf{A} je pásová, pokud $a_{ij} = 0$ pro $|i - j| > p$. Tridiagonální matice pro $p = 1$, pětidiagonální matice pro $p = 2$. Pro pásové matice se používají přímé metody, pro ostatní řídké matice jsou přímé metody většinou neefektivní.

- Soustavy s tridiagonální maticí

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ c_2 & a_2 & b_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_3 & a_3 & b_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & c_n & a_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

Tridiagonální matici zapíšeme do 3 vektorů \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} . V praxi téměř vždy tridiagonální matice, u kterých výběr hlavního prvku není potřebný (silně regulární matice).

Řešení: Předpokládáme zpětný běh $x_k = \mu_k x_{k+1} + \rho_k$. Dosadíme

$$c_i (\mu_{i-1} x_i + \rho_{i-1}) + a_i x_i + b_i x_{i+1} = f_i,$$

po úpravě

$$x_i = \frac{-b_i}{c_i \mu_{i-1} + a_i} x_{i+1} + \frac{f_i - c_i \rho_{i-1}}{c_i \mu_{i-1} + a_i},$$

výsledek

$$\mu_i = \frac{-b_i}{c_i \mu_{i-1} + a_i}, \quad \rho_i = \frac{f_i - c_i \rho_{i-1}}{c_i \mu_{i-1} + a_i}.$$

Startování $c_1 = 0$, $b_n = 0$, $\{\mu_0, \rho_0, x_{n+1}\}$ libovolné.

- Blokově tridiagonální matice: $\mathbf{A}_i, \mathbf{B}_i, \mathbf{C}_i$ jsou malé matice $\Rightarrow \mu_i, \rho_i$ jsou malé matice

2.9 Úlohy se žádným řešením nebo ∞ řešeními

m rovnic o n neznámých, lineárně závislé $n \times n$ systémy.

Metoda SVD (singular value decomposition): pokud $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ má ∞ řešení, určí řešení s nejmenší Eukleidovskou normou a bázi nulprostoru, pokud řešení neexistuje, najde řešení ve smyslu nejmenších čtverců - vektor \vec{x} minimalizující $\|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}\|_{III}$.

SVD: \mathbf{A}, \mathbf{U} matice $m \times n$, $\mathbf{W}, \mathbf{V}, \mathbf{I}$ matice $n \times n$, \mathbf{W} diagonální, \mathbf{I} jednotková, \mathbf{U}, \mathbf{V} ortogonální ($\mathbf{U}^T \cdot \mathbf{U} = \mathbf{V}^T \cdot \mathbf{V} = \mathbf{I}$)

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \cdot \mathbf{W} \cdot \mathbf{V}^T \quad \Rightarrow \quad \vec{x} = \mathbf{V} \cdot [\text{diag}(1/w_j)] \cdot \mathbf{U}^T \cdot \vec{b}$$

Pokud $w_j = 0$ ($w_j \simeq 0$) nahradíme $\frac{1}{w_j} \rightarrow 0$ (signalizuje singularnost matice).

2.10 Rychlost řešení soustav lineárních rovnic (matice $n \times n$) přímými metodami

- Gauss–Jordanova eliminace:
Při výpočtu se provádí $\sim n^3$ vnitřních cyklů (v každém cyklu jedno násobení a jedno sčítání)
- Gaussova eliminace a LU dekompozice:
Přímý běh je podstatně náročnější na počet operací. U obou metod je k výpočtu přímého běhu potřeba $\sim \frac{1}{3}n^3$ vnitřních cyklů. Při zpětném běhu $\sim \frac{1}{2}n(n-1)$ v Gaussově eliminaci. Při LU dekompozici jsou zapotřebí 2 zpětné běhy, ale přímý běh je nepatrně kratší, protože se neupravuje pravá strana, operací je u Gaussovy eliminace i LU dekompozice stejně. Pro výpočet inverzní matice jsou pracnosti Gauss–Jordanovy eliminace, Gaussovy eliminace i LU dekompozice stejné.
- Metoda řádu < 3 :
Byla dokázána (Strassen) existence metody, kde počet operací $\sim N^{\log_2 7}$ ($\log_2 7 \simeq 2.807$) a tedy roste s dimenzí n matice pomaleji než u klasických metod, kde počet operací $\sim n^3$. Tato metoda vyžaduje komplikovanou průběžnou archivaci napočítaných hodnot. Pro malé matice je tato metoda podstatně pomalejší než klasické metody a její výhody se projeví až matice řádu $n \gg 1000$.

3 Gradientní metody

Lineární rovnici $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ řešíme například minimalizací funkce

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{2}|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}|^2.$$

V každém kroku hledáme λ takové, aby $f(\vec{x} + \lambda\vec{u})$ bylo minimální. Tedy

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

Pro řídké matice se složitost násobení vektoru maticí snižuje z počtu operací $\sim n^2$ na počet operací $\sim n$.

Pozn. Nejpoužívanější gradientní metodou je metoda sdružených (konjugovaných) gradientů, kde pro řešení soustavy se symetrickou pozitivně definitní maticí se používá minimalizace funkce

$$f(\vec{x}) = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{A}\vec{x}, \vec{x}) - 2(\vec{b}, \vec{x}) \right].$$

Tuto metodu si ukážeme v kapitole věnované hledání extrémů.

4 Iterační metody řešení soustav lineárních rovnic

4.1 Některé typy matic

- Matice \mathbf{A} typu $n \times n$ je diagonálně dominantní, pokud

$$|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}| \quad \forall i = 1, 2, \dots, n.$$

- Čtvercová matice \mathbf{A} je pozitivně definitní, pokud $\forall \vec{x} \neq \vec{0}$ je skalární součin $(\vec{x}, \mathbf{A}\vec{x}) > 0$.
Symetrická matice je pozitivně definitní právě tehdy, když má všechna vlastní čísla kladná.

4.2 Iterační proces

Řešení \vec{x} lineární rovnice $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ odhadneme vektorem $\vec{x}^{(0)}$ a další přiblížení k přesnému řešení vypočteme pomocí předpisu

$$\vec{x}^{(k+1)} = \mathbf{B}_k \vec{x}^{(k)} + \vec{c}_k.$$

Pro řešení \vec{x} musí platit

$$\vec{x} = \mathbf{B}_k \vec{x} + \vec{c}_k.$$

Odtud vyplývá $\vec{x}^{(k+1)} - \vec{x} = \mathbf{B}_k(\vec{x}^{(k)} - \vec{x}) = \mathbf{B}_k \mathbf{B}_{k-1}(\vec{x}^{(k-1)} - \vec{x}) = \dots$

Pro konvergenci iteračního procesu je tedy nutné a stačí, aby

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \mathbf{B}_k \mathbf{B}_{k-1} \dots \mathbf{B}_0 = \mathbf{0}.$$

Iterační metody dělíme na metody stacionární, které mají matici \mathbf{B} konstantní ($\mathbf{B}_k = \mathbf{B}$), a na metody nestacionární.

4.3 Příklad nestacionární iterační metody

Příkladem nestacionární iterační metody je řízená relaxace. Pro jednoduchost ji ukážeme pro matici \mathbf{A} , která má diagonální členy jednotkové ($a_{ii} = 1$).

Nechť po k -té iteraci je ze složek rezidua $|\mathbf{A}\vec{x} - \vec{b}|$ maximální i -tá složka.

Budeme tedy nulovat i -tou složku rezidua $k + 1$ -ní iterací

$$x_i^{(k+1)} = b_i - a_{i1}x_1^{(k)} - \dots - a_{ii-1}x_{i-1}^{(k)} - a_{ii+1}x_{i+1}^{(k)} - \dots - a_{in}x_n^{(k)}.$$

Matice \mathbf{B}_k a vektor \vec{c}_k mají tvar

$$\mathbf{B}_k = \begin{pmatrix} 1 & & & & & & & \\ & \ddots & & & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ -a_{i1} & \dots & -a_{ii-1} & 0 & -a_{ii+1} & \dots & -a_{in} & \\ & & & 1 & & & & \\ & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix}, \quad \vec{c}_k = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ b_i \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Tato metoda se však nehodí pro využití na počítači, protože vyžaduje v každém kroku hledání rovnice, kde odchylka od řešení je maximální, a to je časově náročné.

4.4 Stacionární iterační metody

Pro všechna vlastní čísla λ matice \mathbf{B} (tedy čísla, pro která existuje takový \vec{v} , že platí $\mathbf{B}\vec{v} = \lambda\vec{v}$) musí platit $|\lambda| < 1$.

Věta Nutnou a postačující podmínkou konvergence metody je podmínka, aby spektrální poloměr $\rho(\mathbf{B})$ byl

$$\rho(\mathbf{B}) = \max_{i=1,\dots,n} |\lambda_i| < 1.$$

Věta Pokud v některé maticové normě platí

$$\|\mathbf{B}\| < 1,$$

pak iterace konverguje.

Odhad chyby. Chceme dosáhnout přesnosti ε a tedy iterovat, dokud nebude

$$\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\| \leq \varepsilon.$$

Výraz $\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\|$ lze odhadnout

$$\|\vec{x}^{(k)} - \vec{x}\| = \|\vec{x}^{(k)} - \mathbf{A}^{-1}\vec{b}\| = \|\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b})\| \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| \|\mathbf{A}\vec{x}^{(k)} - \vec{b}\|.$$

4.5 Prostá iterace

Lineární rovnici $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ převedeme na tvar

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

kde \mathbf{I} je jednotková matice.

Prostá iterace je tedy dána iteračním vzorcem

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

Označíme $\mathbf{B} = \mathbf{I} - \mathbf{A}$, pak lze přesnost k -té iterace odhadnout výrazem

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

Metoda prosté iterace se pro systémy lineárních rovnic prakticky nepoužívá.

4.6 Jacobiho metoda

Předpokladem metody je, že matice \mathbf{A} má nenulové diagonální prvky $a_{ii} \neq 0$.

Složky $k + 1$ Jacobiho iterace řešení jsou dány

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{a_{i1}}{a_{ii}}x_1^{(k)} - \dots - \frac{a_{ii-1}}{a_{ii}}x_{i-1}^{(k)} - \frac{a_{ii+1}}{a_{ii}}x_{i+1}^{(k)} - \dots - \frac{a_{in}}{a_{ii}}x_n^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}}.$$

Matici \mathbf{A} lze zapsat ve tvaru

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} + \mathbf{L} + \mathbf{R},$$

kde \mathbf{D} je diagonální, \mathbf{L} je dolní trojúhelníková a \mathbf{R} horní trojúhelníkovou matici (\mathbf{L} a \mathbf{R} mají nulovou diagonálu).

Jacobiho iteraci lze zapsat ve tvaru

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

Věta Pokud je matice \mathbf{A} diagonálně dominantní, pak Jacobiho metoda konverguje.

Důkaz: Pro diagonálně dominantní matici platí

$$\sum_{j=1, j \neq i}^n \frac{|a_{ij}|}{|a_{ii}|} < 1$$

a tedy řádková norma matice $\|\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{R})\| < 1$.

4.7 Gauss–Seidelova metoda

Gauss–Seidelova metoda je podobná Jacobiho metodě, ale na rozdíl od ní používá při výpočtu složek vektoru $x_i^{(k+1)}$ již dříve vypočtené složky $k + 1$. iterace. Iterace je dána vztahem

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{a_{i1}}{a_{ii}}x_1^{(k+1)} - \dots - \frac{a_{ii-1}}{a_{ii}}x_{i-1}^{(k+1)} - \frac{a_{ii+1}}{a_{ii}}x_{i+1}^{(k)} - \dots - \frac{a_{in}}{a_{ii}}x_n^{(k)} + \frac{b_i}{a_{ii}}.$$

Vztah lze zapsat vektorově

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

Věta Pro konvergenci Gauss–Seidelovy metody stačí, když platí libovolná z následujících dvou podmínek:

1. \mathbf{A} je diagonálně dominantní matice
2. \mathbf{A} je symetrická pozitivně definitní matice

4.8 Superrelaxační metoda

Gauss–Seidelova metoda konverguje pro poměrně širokou třídu matic, ale její konvergence může být velmi pomalá. Označíme-li $\Delta x_i^{(k)} = x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}$ rozdíl mezi iteracemi Gauss–Seidelovou metodou, pak je superrelaxační metoda dána vztahem

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \omega \Delta x_i^{(k)},$$

kde relaxační faktor ω je z intervalu $(0, 2)$, obvykle $\omega \in \langle 1, 2 \rangle$.

Relaxační faktor slouží k urychlení konvergence metody a jeho optimální hodnotu lze vypočítat ze vztahu

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho^2(\mathbf{B})}}, \quad \mathbf{B} = -(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{R}.$$

\mathbf{B} je iterační matice Gauss–Seidelovy metody. Gauss–Seidelova metoda je tedy speciálním případem superrelaxační metody s $\omega = 1$.

5 Hledání vlastních čísel a vektorů

5.1 Úvod

Nechť pro číslo λ existuje vektor $\vec{x} \neq \vec{0}$ takový, že $\mathbf{A}\vec{x} = \lambda\vec{x}$. Pak λ je vlastní číslo a \vec{x} je vlastní vektor matice \mathbf{A} .

Dva typy úloh

1. Úplný problém vlastních čísel – hledání všech vlastních čísel matice a popřípadě i příslušných vlastních vektorů
2. Částečný problém vlastních čísel – hledání 1 nebo několika vlastních čísel (obvykle největších)

Charakteristický polynom matice \mathbf{A} : determinant $\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})$.

Pozn. Je-li \mathbf{A} matice $n \times n$, je charakteristický polynom n -tého stupně, a tedy má n kořenů (mohou být i vícenásobné). Ke každému vlastnímu číslu \exists alespoň 1 vlastní vektor. Počet l lineárně nezávislých (LN) vlastních vektorů je $l \leq k$ (k je násobnost vlastního čísla).

Pozn. Matice defektní má $< n$ lineárně nezávislých vlastních vektorů. Příklad

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = (1 - \lambda)^2 = 0, \quad \text{a tedy } \lambda_{1,2} = 1.$$

Vektor $\vec{x} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ je jediným vlastním vektorem \mathbf{A} .

Pozn. Reálná matice může mít komplexně sdružená vlastní čísla a vlastní vektory. Například

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) = (1 - \lambda)^2 + 1 = 0, \quad \text{a tedy } \lambda_{1,2} = 1 \pm i.$$

Vlastní vektory jsou $\vec{x}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ -i \end{pmatrix}$ a $\vec{x}_2 = \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix}$.

Normální matice \mathbf{A} je taková, že $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{A}\mathbf{A}^T$. Normální matice řádu n má n LN vlastních vektorů.

Pozn. Symetrická matice ($\mathbf{A} = \mathbf{A}^T$) má všechna vlastní čísla reálná.

Pozn. Trojúhelníkové matice mají všechna vlastní čísla na diagonále.

Věta Podobné matice \mathbf{A} a $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}$ mají stejná vlastní čísla (stejné spektrum).

Důkaz:

$$\begin{aligned}\det(\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P} - \lambda\mathbf{I}) &= \det[\mathbf{P}^{-1}(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\mathbf{P}] = \\ &= \det(\mathbf{P}^{-1}) \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I}) \det(\mathbf{P}) = \det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{I})\end{aligned}$$

Pokud je vektor \vec{x} vlastním vektorem matice \mathbf{A} , pak vektor $\mathbf{P}^{-1}\vec{x}$ je vlastním vektorem matice $\mathbf{P}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{P}$.

Věta Ke každé matici existuje jí podobná matice v Jordanově normálním tvaru

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{J}_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \mathbf{J}_2 & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathbf{J}_s \end{pmatrix}, \quad \text{kde } \mathbf{J}_i = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 1 & \lambda & 0 & & 0 \\ 0 & 1 & \lambda & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{pmatrix}.$$

Pozn. Pro každou normální matici existuje podobná matice diagonální.

Pozn. Neexistuje finitní postup jak provést transformaci matice na Jordanův normální tvar.

Numerické metody řešení úplného problému vlastních čísel

1. Sekvencí elementárních transformací převedeme matici na přibližně diagonální tvar (příp. Jordanův normální tvar) nebo přibližně speciální typ (např. tridiagonální nebo Hessenbergovu matici).
2. Rozložíme matici \mathbf{A} na součin dvou matic $\mathbf{A} = \mathbf{F}_L \cdot \mathbf{F}_R$. Matice $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{F}_R\mathbf{F}_L$ je podobná matici \mathbf{A} .
Odvození: $\mathbf{F}_R\mathbf{F}_L = \mathbf{F}_L^{-1}\mathbf{F}_L\mathbf{F}_R\mathbf{F}_L = \mathbf{F}_L^{-1}\mathbf{A}\mathbf{F}_L$.

Posloupnost je tedy shora odhadnuta geometrickou posloupností s kvocientem < 1 .

5.3 LU rozklad pro úplný problém vlastních čísel

Tato metoda konverguje velmi pomalu, na výpočet je třeba velký počet operací.

Matice \mathbf{A} je nultým krokem iterace, t.j. $\mathbf{A}_0 \equiv \mathbf{A}$. V k -tém kroku rozložíme matici $\mathbf{A}_k = \mathbf{L}_k \mathbf{U}_k$. Vytvoříme matici $\mathbf{A}_{k+1} = \mathbf{U}_k \mathbf{L}_k$, ta je podobná matici \mathbf{A}_k .

Pokud posloupnost $\mathbf{B}_k = \mathbf{L}_0 \mathbf{L}_1 \dots \mathbf{L}_k \rightarrow$ k regulární matici, potom matice $\mathbf{A}_k \rightarrow$ k horní trojúhelníkové matici, která má na diagonále vlastní čísla.

Existují ale speciální rozklady matic vhodné pro hledání vlastních čísel a vektorů. Pro tyto rozklady konverguje obdobný postup rychle.

5.4 Částečný problém vlastních čísel

Hledáme vlastní číslo největší v absolutní hodnotě.
Zvolíme libovolný vektor $\vec{x}^{(0)}$. Dále počítáme iterace

$$\vec{x}^{(k+1)} = \frac{1}{\varrho_k} \mathbf{A} \vec{x}^{(k)}, \quad \text{kde} \quad \varrho_k = \vec{e}_1^T \mathbf{A} \vec{x}^{(k)} \quad (\text{příp. } \varrho_k = \|\mathbf{A} \vec{x}^{(k)}\|).$$

Pak platí

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \varrho_k = \lambda_1 \quad \vee \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \vec{x}^{(k)} = \vec{x}_1.$$

Pokud chceme další vlastní číslo, redukuje matici na řád $(n-1)$. Je-li vektor $\vec{x}_1 = (u_1, \dots, u_n)^T$, platí

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

a tedy hledáme maximální vlastní číslo matice \mathbf{B} .

Pozn. Nevýhodou je postupná ztráta přesnosti.

Pozn. Pro výpočet nejmenšího vlastního čísla lze nalézt největší vlastní číslo matice \mathbf{A}^{-1} . Pro hledání vlastního čísla v určité oblasti lze provést posun, neboť $(\mathbf{A} + \mu \mathbf{I}) \vec{x} = (\lambda + \mu) \vec{x}$.