21.11.'16

(16)

Numerické řešení soustav lin. rovnic

Mějme regulární matici $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ a vektor $\bar{b} \in \mathbb{R}^n$.
Hledáme $\bar{u} \in \mathbb{R}^n$ tak, že

$$\boxed{A \cdot \bar{u} = \bar{b}}.$$

Připomeňme si Gaussovu eliminační metodu (bez pivotování) a s ní související LU-rozklad:

```
L~ := I; U := A; c̄ := b̄
for i = 1:n-1
   for j = 2:n
      L~_ji := - a_ii / a_ji
      for k = j:n
         U_jk := U_ii - L~_ji · U_jk
      end for
      c_j := c_i - L~_ji · c_j
   end for
end for
```

Řešení získáme zpětným dosazováním

```
for i = n:-1:1
   u_i := c_i / U_ii
   for j = 1:i-1
      c_j := c_j - u_i · U_ji
   end for
end for
```

Zároveň jsme získali faktory $\tilde{L}, U \in \mathbb{R}^{n\times n}$: $\boxed{\tilde{L} \cdot A = U}$, což nám umožní snáze řešit případnou další soustavu $A \cdot \bar{v} = \bar{d} \Leftrightarrow U \cdot \bar{v} = \tilde{L} \cdot \bar{d}$, kterou vyřešíme zpětným dos.

Budeme se zabývat přibližným řešením.

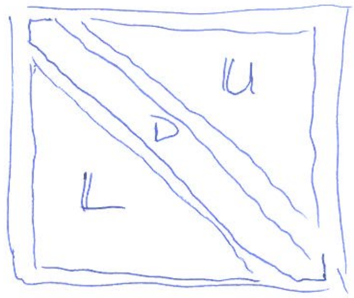
Lineární iterační metody

$$\boxed{\bar{u}^{k+1} := \mathbb{M} \cdot \bar{u}^k + \mathbb{N}\bar{b}}$$

Def. Konzistentní metoda $\overset{def.}{\Longleftrightarrow}$ $\mathbb{M} \cdot \bar{u} + \mathbb{N}\bar{b} = \bar{u} \Leftrightarrow \mathbb{M} = I - N \cdot A$

Konvergentní metoda $\Leftrightarrow$ $\bar{u}^k \to \bar{u}$ pro $k \to \infty$ $\Leftrightarrow$ $\|\mathbb{M}\| < 1$

Rozložme matici na $\mathbb{A} = \mathbb{D} + \mathbb{L} + \mathbb{U}$,

$A =$ 

např. $\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$

$\mathbb{D} = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$, $\mathbb{L} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$

$\mathbb{U} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$

Jacobiho metoda

$$\boxed{\mathbb{D} \cdot \bar{u}^{k+1} = \bar{b} - (\mathbb{L} + \mathbb{U}) \cdot \bar{u}^k}$$

$$\Updownarrow$$

$$\boxed{(\bar{u}^{k+1})_i := \frac{1}{a_{ii}} \Big[b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} a_{ij} (\bar{u}^k)_j \Big]}$$

$$= \frac{1}{a_{ii}} \Big[b_i - \sum_{j<i} a_{ij} (\bar{u}^k)_j - \sum_{j>i} a_{ij} (\bar{u}^k)_j \Big] \qquad (*)$$

Metoda je konzistentní: $\bar{b} - (\mathbb{L} + \mathbb{U}) \cdot \bar{u} = \mathbb{D} \cdot \bar{u}$

Metoda je konvergentní $\Leftrightarrow \|M\| = \|D^{-1}(L+U)\| < 1$,

což splňují např. diagonálně dominantní matice:

$$\forall i : \ |a_{ii}| > \sum_{j \neq i} a_{ij}$$

Gaussova-Seidelova metoda

~~Druhý~~ Člen $-\sum_{j<i} a_{ij} (\bar{u}^k)_j$ lze počítat z aktualizace $\bar{u}^{k+1}$

$$\boxed{(\bar{u}^{k+1})_i := \frac{1}{a_{ii}} \Big[b_i - \sum_{j<i} a_{ij} \cdot (\bar{u}^{k+1})_j - \sum_{j>i} a_{ij} \cdot (\bar{u}^k)_j \Big]}$$

$$\Updownarrow$$

$$\boxed{(\mathbb{D} + \mathbb{L})\, \bar{u}^{k+1} = \bar{b} - \mathbb{U} \cdot \bar{u}^k}$$

Metoda je opět konzistentní

a je konvergentní, právě když $\|(D+L)^{-1} U\| < 1$.

Richardsonova metoda

$$\boxed{\bar u^{k+1} := \bar u^k + \omega \cdot \bar r^k}, \text{ kde } \bar r^k := \bar b - A\,\bar u^k \text{ .. reziduum}$$

$$\omega > 0$$

Metoda je konzistentní pro lib. ω: $\bar u + \omega \cdot [\underbrace{\bar b - A\cdot \bar u}_{=\bar 0}] = \bar u$

Studujme konvergenci pro A symetrickou, pozitivně definitní (spd)

Vl. čísla, vl. vektory $A\cdot\bar v_i = \lambda_i \bar v_i$, $\|\bar v_i\| = 1$

splňují

$$0 < \lambda_1 \le \lambda_2 \le \lambda_3 \le \dots \le \lambda_n$$

$$\underbrace{\bar v_1 \oplus \bar v_2 \oplus \bar v_3 \oplus \dots \oplus \bar v_n}_{\text{ortonormální báze } \mathbb{R}^n} = \mathbb{R}^n$$

Reziduum $\bar r^{k+1}$ (podobně jako chyba $\bar e^{k+1} := \bar u - \bar u^{k+1}$) se šíří takto:

$$\bar r^{k+1} = \bar b - A\,\bar u^{k+1} = \bar b - A[\bar u^k + \omega\,\bar r^k] = \overbrace{(I - \omega A)}^{=M}\,\bar r^k$$

$$\bar r^{k+1} = \sum_{i=1}^{n} \boxed{\alpha_i^{k+1}}\,\bar v_i, \qquad \bar r^k = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i^k \bar v_i$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \boxed{(1-\omega\lambda_i)\,\alpha_i^k}\,\bar v_i$$

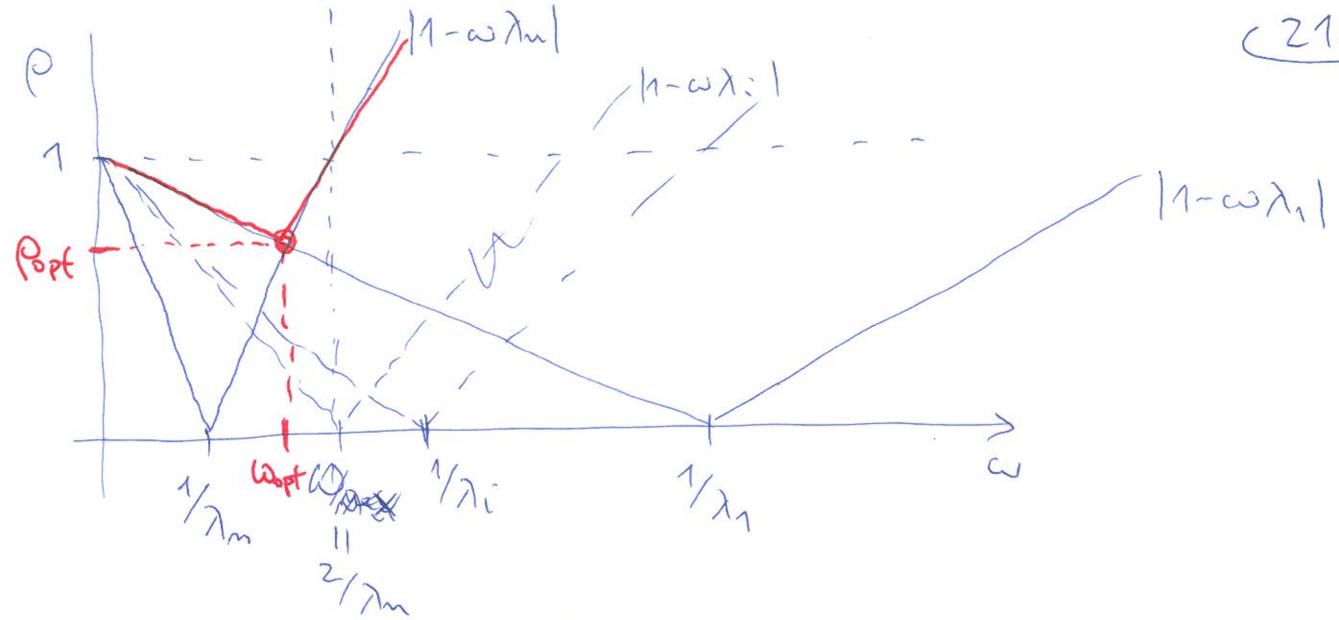
Metoda konverguje, právě když

$$\boxed{\forall i : |1 - \omega\lambda_i| < 1}, \text{ p.}$$

~~přičemž~~

s konvergenčním faktorem ρ: $\|\bar r^{k+1}\| \le \rho \cdot \|\bar r^k\|$

$$\boxed{\rho := \max_{i \in \{1,\dots,n\}} |1 - \omega\lambda_i|}$$



Z obrázku lze vidět, že Richardsonova metoda konverguje pro $\omega \in \left(0, \frac{2}{\lambda_n}\right)$, přičemž optimální konvergence je dosaženo v ω_{opt}:

$$1-\omega_{opt}\lambda_n = -(1-\omega_{opt}\lambda_1)$$

$$\boxed{\omega_{opt} = \frac{2}{\lambda_1+\lambda_n}}$$

s optimálním konvergenčním faktorem:

$$\boxed{\rho_{opt} = 1-\omega_{opt}\lambda_1 = 1-\frac{2\lambda_1}{\lambda_1+\lambda_n} = \frac{\lambda_n-\lambda_1}{\lambda_n+\lambda_1}\cdot\frac{1/\lambda_1}{1/\lambda_1} = \frac{K(A)-1}{K(A)+1}},$$

kde $K(A) := \frac{\lambda_n}{\lambda_1}$ je <u>číslo podmíněnosti</u> A

<u>Počet iterací postačujících k dosažení rel. přesnosti ε.</u>

$$\|r^k\| \le \boxed{(\rho_{opt})^k \cdot \|r^0\| \overset{!}{\le} \varepsilon\cdot\|r^0\|} \Leftarrow k \ge \frac{\log\varepsilon}{\log\rho_{opt}}$$

$\rho_{opt},\ \varepsilon \in (0,1)$

Prakticky platí (viz průběh funkce $\frac{1}{\log\frac{K-1}{K+1}}$):

$$\boxed{k \,\dot{\geq}\, \frac{\ln 10}{2}\cdot K(A)\cdot|\log\varepsilon|}$$

tj. s každou další platnou cifrou potřebujeme provést cca $\frac{\ln 10}{2}\cdot K(A)$ iterací.

Čebyševova metoda

$$\boxed{\bar u^{k+1} := \bar u^k + \omega_k \cdot \bar r^k}\ , \quad \bar r^k := \bar b - A\bar u^k$$

$$\omega_0, \omega_1, \dots, \omega_k > 0$$

~~Uvažujme~~ Uvažujme opět pouze spd-matice A.

Reziduum po k-té iteraci vypadá takto:

$$r^k = (I-\omega_{k-1}A)\, r^{k-1} = \dots = \underbrace{(I-\omega_{k-1}A)\cdots(I-\omega_0 A)}_{=\text{„}M^k\text{"}}\, r^0$$

Pro jeho souřadnice v ortonormální bázi vl. vektorů platí:

$$\alpha_i^k = (1-\omega_{k-1}\lambda_i)\cdot(1-\omega_{k-2}\lambda_i)\cdots(1-\omega_0\lambda_i)\cdot\alpha_i^0$$

Metoda tedy ~~konverguje~~ po k-té iteraci konverguje, pokud

$$\forall i: \ |\underbrace{(1-\omega_{k-1}\lambda_i)\cdots(1-\omega_0\lambda_i)}_{=\rho^k}| < 1$$

Optimální konvergence je dosaženo pro $\bar\omega_{opt}\in\mathbb{R}^k$:

$$\bar\omega_{opt} = \arg\min_{\bar\omega\in\mathbb{R}^k}\ \max_{i\in\{1,\dots,n\}} |(1-\omega_{k-1}\lambda_i)\cdots(1-\omega_0\lambda_i)|.$$

To je těžká úloha. Spokojme se s pseudo-optimem

$$\bar\omega_{opt} = \arg\min_{\bar\omega\in\mathbb{R}^k}\ \max_{\lambda\in\langle\lambda_1,\lambda_n\rangle} |\underbrace{(1-\omega_{k-1}\lambda)\cdots(1-\omega_0\lambda)}_{=P_k^{\bar\omega}(\lambda)\in\mathcal{P}_k\,:\ P_k^{\bar\omega}(0)=1}|$$

Lze (snadno) vidět, viz čebyševovu interpolace, že $\bar\omega_{opt}$ jsou kořeny^{-1} škálovaného Čebyševova polynomu:

$$\tilde T_k(\lambda) := \frac{T_k\left(\frac{\lambda_n+\lambda_1-2\lambda}{\lambda_n-\lambda_1}\right)}{T_k\left(\frac{\lambda_n+\lambda_1}{\lambda_n-\lambda_1}\right)}\ ; \quad \boxed{\omega_{opt,i} = \left[\frac{\lambda_1+\lambda_n}{2} - \frac{\lambda_n-\lambda_1}{2}\,\tilde x_i^{(k)}\right]^{-1}, \ \text{kde } \tilde x_i^{(k)} := \cos\frac{(2i+1)\pi}{2k},\ i=0,\dots,k-1}$$

a $\boxed{\rho^k_{opt} \le 2\cdot\left(\frac{\sqrt{\kappa(A)}-1}{\sqrt{\kappa(A)}+1}\right)^k}$ $\rightsquigarrow$ počet iterací $\approx \sqrt{\kappa(A)}\cdot|\log\varepsilon|$

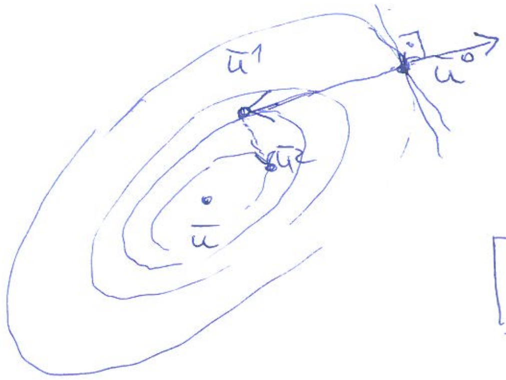
Gradientní metody (nelineární iterační metody)

Metoda největšího spádu

$A\cdot\bar u = b$, A .. spd-matice

$\Updownarrow$

$$\boxed{\bar u = \arg\min_{\bar w\in\mathbb{R}^n} \underbrace{\left(\tfrac{1}{2}\bar w^T\cdot A\bar w - \bar b^T\cdot \bar w\right)}_{=:\varphi(\bar w)\ \text{..kvadratická funkce}\ \mathbb{R}^n\to\mathbb{R}}}$$



$$\nabla\varphi(\bar u^0) = -\bar r^0 = A\cdot\bar u^0 - \bar b$$

$$\boxed{\bar u^{k+1} := \bar u^k + \alpha_k\cdot\bar r^k},$$

kde
$$\alpha_k := \arg\min_{\alpha>0} \underbrace{\varphi(\bar u^k + \alpha\bar r^k)}$$
$$= \tfrac12(\bar u^k+\alpha\bar r^k)^T A\cdot(\bar u^k+\alpha\bar r^k) - \bar b^T(\bar u^k+\alpha\bar r^k)$$
$$= \tfrac12\alpha^2\|\bar r^k\|_A^2 + \alpha\underbrace{(\bar u^{k\,T} A\bar r^k - \bar b^T\bar r^k)}_{=-\|\bar r^k\|^2} + \dots$$

Pokud $\bar r^k \neq \bar o$, pak je minima dosaženo v
$$\boxed{\alpha_k := \frac{\|\bar r^k\|^2}{\|\bar r^k\|_A^2}}$$

Algoritmus:

Dáno: $\overset{spd}{A}$, $\bar b$, $\bar u^0$, $\varepsilon\in(0,1)$

```
r^0 := b - A u^0, k := 0
while ||r^k||_A / ||r^0||_A > ε
    α_k := ||r^k||^2 / ||r^k||_A^2
    u^{k+1} := u^k + α_k r^k
    r^{k+1} := b - A u^{k+1}
    k := k+1
end while
```

Konvergence je velmi pomalá:

$$\boxed{\rho_k := \max_{i\in\{1,\dots,n\}}|1-\alpha_k\lambda_i| = \max_i\left|1-\frac{\lambda_i\cdot\sum_j(\gamma_j^k)^2}{\sum_j\lambda_j(\gamma_j^k)^2}\right| \leq \left|1-\frac{\lambda_1}{\lambda_n}\right|},$$

kde $\bar r^k = \sum_{j=1}^n \gamma_j^k\bar v_j$; $A\bar v_j = \lambda_j\bar v_j$, $\|\bar v_j\| = 1$

Podobně konvergence v A-normě:

$$\|\bar r^{k+1}\|_A = \sqrt{\sum_j\lambda_j(1-\alpha_k\lambda_j)^2(\gamma_j^k)^2} \leq \underbrace{\max_i|1-\alpha_k\lambda_i|}_{=\rho_k}\cdot\underbrace{\sqrt{\sum_j\lambda_j(\gamma_j^k)^2}}_{=\|\bar r^k\|_A}$$

$$\|\bar r^{k+1}\|_A = \sqrt{\sum_j\lambda_j(\gamma_j^{k+1})^2}$$

Metoda sdružených gradientů (A-spd)

Zaveďme Krylovovský prostor $K^k(A, \bar r^0) := \langle \bar r^0, A\bar r^0, \dots, A^{k\cancel{-1}}\bar r^0 \rangle$

V každé iteraci budeme realizovat minimum (A-ortog. projekce)

$$\boxed{\bar u^{k+1} := \underset{\bar w \in \bar u^0 + K^k(A,\bar r^0)}{\arg\min} \varphi(\bar w) = \underset{\bar w \in \bar u^0 + K^k(A,\bar r^0)}{\arg\min} \|\bar u - \bar w\|_A}$$

<u>Důkaz.</u> $\frac{1}{2}\|\bar u - \bar w\|_A^2 = \underbrace{\frac{1}{2}\bar w^T A \bar w - \underset{\bar u^T A}{\overset{\parallel}{\bar b^T}} \bar w}_{=\varphi(\bar w)} + \frac{1}{2}\bar u^T A \bar u$ □

Zároveň budeme budovat A-ortogonální bázi $\Leftrightarrow \bar p_i^{\,T} A \bar p_j = \delta_{ij}$

$$\langle \bar p^0 := \bar r^0, \bar p^1, \dots, \bar p^{k\cancel{-1}} \rangle = K^k(A, \bar r^0).$$

<u>Platí</u>:

1) $\bar r^{k+1} \perp K^k(A, \bar r^0)$ (nebo $\bar r^{k+1} = \bar o$)

<u>Důkaz.</u> $\bar r^{k+1} = -\nabla\varphi(\bar u^{k+1})$, přičemž v $\bar u^{k+1}$ je dosaženo minima. □

2) $\bar r^{k+1} \perp_A K^{k-1}(A, \bar r^0)$

<u>Důkaz.</u>
$$1) \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \bar r^{k+1} \perp A \bar r^0 \Leftrightarrow \\ \vdots \\ \bar r^{k+1} \perp A^{k\cancel{-1}} \bar r^0 \Leftrightarrow \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} \bar r^{k+1} \perp_A \bar r^0 \\ \vdots \\ \bar r^{k+1} \perp_A A^{k-1} \bar r^0 \end{array} \right\} \Leftrightarrow$$ □

3) Nechť $(\bar p^0, \dots, \bar p^k)$ je A-ortogonální báze $K^{k}(A, \bar r^0)$,

pak $\boxed{\bar p^{k+1} := \bar r^{k+1} + \beta_k \bar p^k} \perp_A K^{k-1}(A, \bar r^0)$

<u>Důkaz.</u> Přímý důsledek 1) a 2).

Stačí najít β_k : $\bar p^{k+1} \perp_A \bar p^k \Leftrightarrow \boxed{\beta_k = -\dfrac{\bar r^{k+1} \cdot A \cdot \bar p^k}{\bar p^k \cdot A \cdot \bar p^k}}$

4) $(\bar p^0, \dots, \bar p^{k+1})$ je A-ortogonální báze $K^{k+1}(A, \bar r^0) = \langle \bar r^0, \dots, A^{k+1}\bar r^0 \rangle$

<u>Důkaz.</u> $\bar p^{k+1} = \underset{\in}{\bar r^{k+1}} + \dots = \bar b - A \underset{\in \bar u^0 + K^k}{\bar u^{k+1}} + \dots$

tj. $A K^k \subset \langle \bar p^0, \dots, \bar p^{k+1} \rangle$ □

5) $\boxed{\bar u^{k+1} = \bar u^k + \alpha_k \bar p^{k}}$, kde $\boxed{\alpha_k = \dfrac{\bar r^k \cdot \bar p^k}{\bar p^k \cdot A \cdot \bar p^k}}$

<u>Důkaz.</u> Pokud $\bar u^k \neq \bar u$, pak ~~$\bar u^{k+1} - \bar u^k \perp_A K^k(A, \bar r^0)$~~

viz ~~$\|\bar u - \bar u^k\|_A \leq \|\bar u - \bar w\|_A$~~ $\forall \varepsilon \in \mathbb{R}\ \forall \bar v \in K^k$:

$$\|\bar u - (\bar u^{k+1} + \varepsilon \bar v)\|_A^2 \geq \|\bar u - \bar u^{k+1}\|_A^2 \underset{\varepsilon \to 0-}{\overset{\varepsilon \to 0+}{\Rightarrow}} \begin{array}{l} (\bar u - \bar u^{k+1}) A \bar v \geq 0 \\ (\bar u - \bar u^{k+1}) A \bar v \leq 0 \end{array}$$ □

Algoritmus metody sdruž. grad.

Dáno: A - spd, $\bar{b}$, $\bar{u}^0$, $\varepsilon \in (0,1)$

$$
\boxed{
\begin{array}{l}
\bar{r}^0 := \bar{b} - A\bar{u}^0 \\
\bar{p}^0 := \bar{r}^0 \\
k := 0 \\
\text{while } \|\bar{r}^k\|_A / \|\bar{r}^0\|_A > \varepsilon \\
\quad \alpha_k := \dfrac{\bar{r}^k \cdot \bar{p}^k}{\bar{p}^k \cdot A \cdot \bar{p}^k} \\
\quad \bar{u}^{k+1} := \bar{u}^k + \alpha_k \bar{p}^k \\
\quad \bar{r}^{k+1} := \bar{b} - A\bar{u}^{k+1} \\
\quad \beta_k := -\dfrac{\bar{r}^{k+1} \cdot A \cdot \bar{p}^k}{\bar{p}^k \cdot A \cdot \bar{p}^k} \\
\quad \bar{p}^{k+1} := \bar{r}^{k+1} + \beta_k \bar{p}^k \\
\quad k := k+1 \\
\text{end while}
\end{array}
}
$$

Konvergence

$$\|\underbrace{\bar{u} - \bar{u}^{k+1}}_{\bar{e}^{k+1}}\|_A \leq \|\bar{u} - \bar{u}^0 - p_k(A)\cdot \bar{r}^0\|_A$$

$$= \|\underbrace{(I - p_k(A)\cdot A)}_{=: q_{k+1}(A)\, \in \mathbb{P}_{k+1} \,:\, q_{k+1}(0) = 1} \cdot \bar{e}^0\|_A$$

Podobně pro $\bar{r}^{k+1} = A \cdot \bar{e}^{k+1}$:

$$\|\bar{r}^{k+1}\|_A \leq \|q_{k+1}(A) \cdot \bar{r}^0\|_A$$

$$\bar{r}^0 =: \sum_j \gamma_j^0 \bar{v}_j, \quad \bar{r}^{k+1} =: \sum_j \gamma_j^{k+1} \bar{v}_j$$

$$\|\bar{r}^0\|_A = \sqrt{\sum_j \lambda_j (\gamma_j^0)^2}, \quad \|\bar{r}^{k+1}\|_A = \sqrt{\sum_j \lambda_j (\gamma_j^{k+1})^2}$$

$$\boxed{\|\bar{r}^{k+1}\|_A = \min_{\substack{q_{k+1} \in \mathbb{P}_{k+1} \\ q_{k+1}(0) = 1}} \|q_{k+1}(A)\, \bar{r}^0\|_A}$$

$$= \min_{\boxed{\dots}} \sqrt{\sum_j \lambda_j [q_{k+1}(\lambda_j)\, \gamma_j^0]^2}$$

$$\leq \min_{\boxed{\dots}} \max_i |q_{k+1}(\lambda_i)| \cdot \|\bar{r}^0\|_A$$

$$\boxed{\leq 2 \left(\frac{\sqrt{\kappa(A)} - 1}{\sqrt{\kappa(A)} + 1} \right)^{k+1} \cdot \|\bar{r}^0\|_A} \quad \text{(deb. met.)}$$