Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Ph.D. akademie, 4. listopadu 2022, FEI VŠB-TU Ostrava

Dalibor Lukáš

Katedra aplikované matematiky, FEI
VŠB-TU Ostrava

web: http://homel.vsb.cz/~luk76
email: dalibor.lukas@vsb.cz

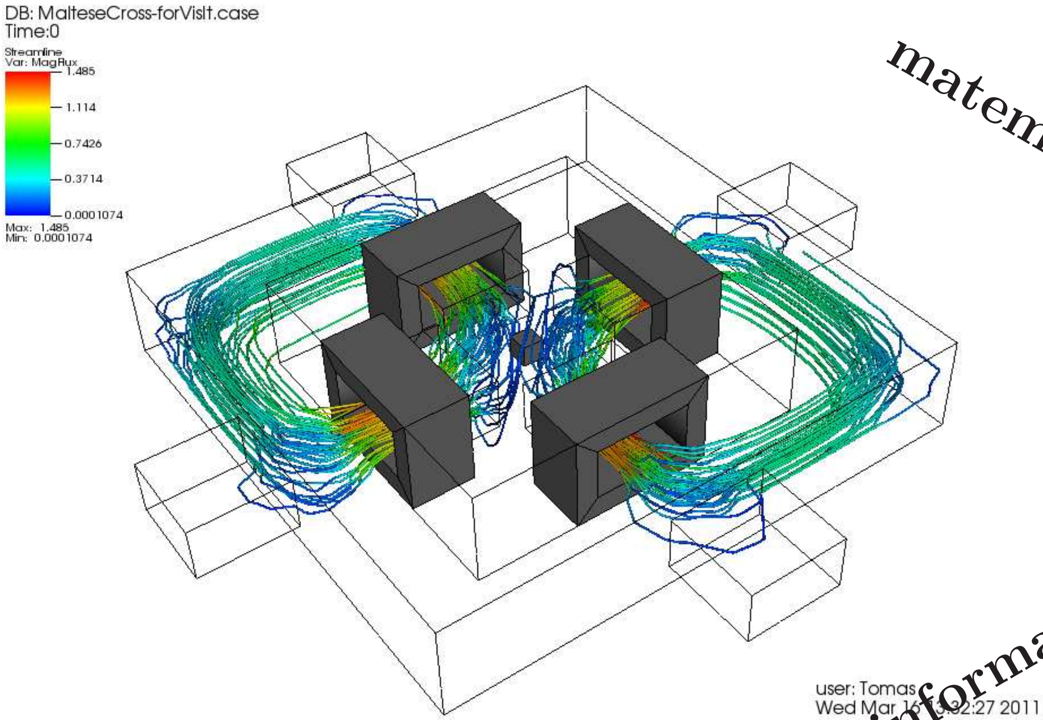
VŠB TECHNICKÁ UNIVERZITA OSTRAVA | FAKULTA ELEKTROTECHNIKY A INFORMATIKY | KATEDRA APLIKOVANÉ MATEMATIKY

Motivace

Matematika pro řešení náročných technických úloh

aplikace

matematika

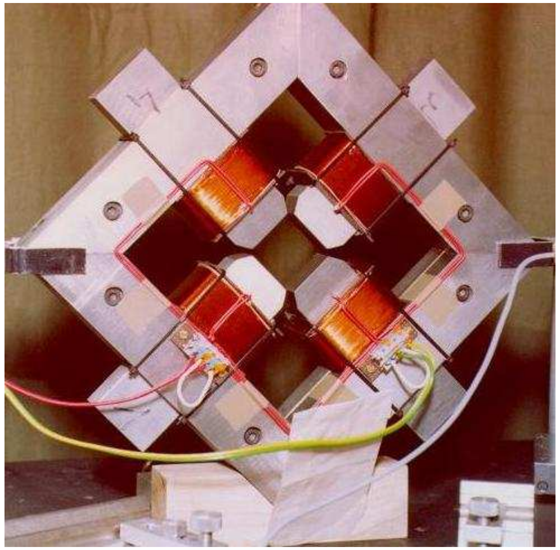


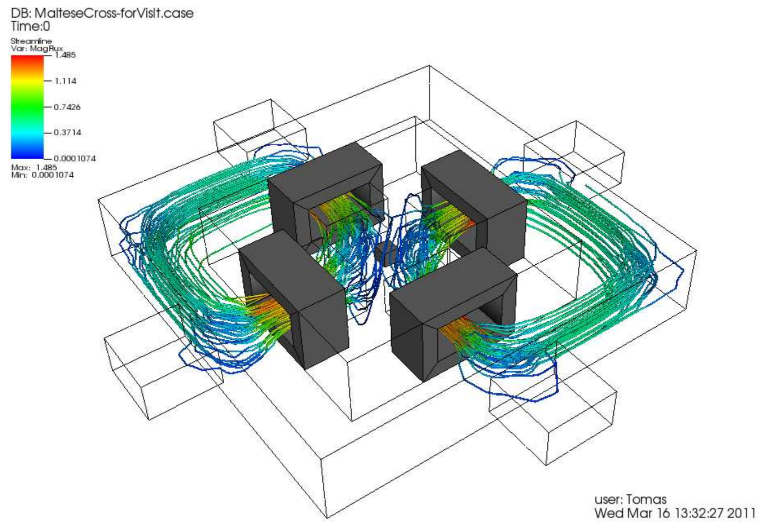
fyzika

informatika

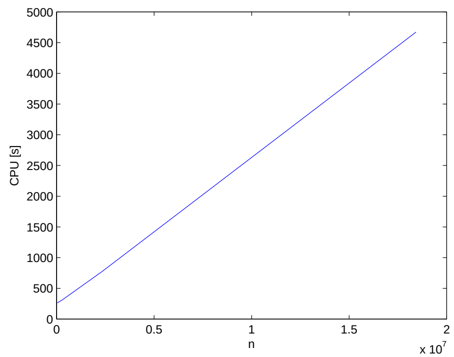
Motivace

Soustavy lin. rovnic: mag. pole elektromagnetu — 18 milionů rovnic/neznámých





úroveň	počet hran	PCG iter.	CPU	Mem
0	39.310	1	4 min 23 s	269 MB
1	299.166	3	5 min 20 s	834 MB
2	2.333.312	3	13 min	5,14 GB
3	18.428.912	3	1 h 18 min	39,64 GB



1 hodina na notebooku — 18 GFlops: Multigrid vyřeší 14 milionů rovnic

Motivace

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic

Jakou největší čtvercovou soustavu lineárních rovnic by vypočítal za 1 hodinu nejlepší, viz www.top500.org, počítač na světě, americký Frontier, Kramerovým pravidlem bez použití řádkových úprav, uvažujeme-li pouze instrukce sčítání, odčítání, násobení a dělení, kterých provede $1,102 \cdot 10^{18}$ za sekundu?

Motivace

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic: počet operací

Uvažujme soustavu n lineárních rovnic o n neznámých mající právě jedno řešení.

Kramerovo pravidlo

$$x_i = \frac{D_i}{D} \quad \text{pro } i = 1, 2, \ldots, n$$

vyžaduje n dělení a výpočet $n+1$ determinantů řádu n. Např. pro $n = 3$

$$D = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{vmatrix} = 1 \begin{vmatrix} 5 & 6 \\ 8 & 9 \end{vmatrix} - 2 \begin{vmatrix} 4 & 6 \\ 7 & 9 \end{vmatrix} + 3 \begin{vmatrix} 4 & 5 \\ 7 & 8 \end{vmatrix} = 1 \cdot (5 \cdot 9 - 6 \cdot 8) - 2 \cdot (4 \cdot 9 - 6 \cdot 7) + 3 \cdot (4 \cdot 8 - 5 \cdot 7)$$

je třeba $\mathrm{N}(3) = 3 + 3\,\mathrm{N}(2) = 3 + 3 \cdot 2$ násobení a $\mathrm{M}(3) = 2 + 3\,\mathrm{M}(2)$ sčítání/odčítání.

Kramerovo pravidlo s výpočtem determinantů rozvojem podle řádků vyžaduje

- n dělení,
- $(n+1)\,\mathrm{N}(n)$ násobení, kde $\mathrm{N}(n) = n\,(1 + \mathrm{N}(n-1))$ a $\mathrm{N}(1) = 0$ a
- $(n+1)\,\mathrm{M}(n)$ sčítání/odčítání, kde $\mathrm{M}(n) = n - 1 + n\,\mathrm{M}(n-1)$ a $\mathrm{M}(1) = 0$.

Motivace

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic: počet operací

Kramerovo pravidlo s výpočtem determinantů rozvojem podle řádků vyžaduje

$$\mathrm{Op}(n) = n + (n+1)\,(\mathrm{N}(n) + \mathrm{M}(n)) \text{ operací}, \quad \mathrm{CPU}(n) = \frac{\mathrm{Op}(n)}{1{,}102\mathrm{e}18}[\mathrm{s}],$$

kde $\mathrm{N}(n) = n\,(1 + \mathrm{N}(n-1))$, $\mathrm{N}(1) = 0$ a $\mathrm{M}(n) = n\,(1 + \mathrm{M}(n-1)) - 1$, $\mathrm{M}(1) = 0$.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$\mathrm{N}(n)$	0	2	9	40	205	1236	8659	69280	623529	6236300
$\mathrm{M}(n)$	0	1	5	23	119	719	5039	40319	362879	3628799
$\mathrm{Op}(n)$	1	11	59	319	1949	13691	109591	986399	9864089	108505099
$\mathrm{CPU}(n)$	9,1e-19	1,0e-17	5,4e-17	2,9e-16	1,8e-15	1,2e-14	9,9e-14	9.0e-13	9,0e-12	9,8e-11

n	11	12	13	14	15	...	19	20	21	22
$\mathrm{N}(n)$	6,9e7	8,2e8	1,1e10	1,5e11	2,2e12	...	2,1e17	4,2e18	8,8e19	1,9e21
$\mathrm{M}(n)$	4,0e7	4,8e8	6,2e9	8,7e10	1,3e12	...	1,2e17	2,4e18	5,1e19	1,12e21
$\mathrm{Op}(n)$	1,3e9	1,7e10	2,4e11	3,6e12	5,7e13	...	6,6e18	1,4e20	3,1e21	7,0e22
$\mathrm{CPU}(n)$	1,2e-9	1,5e-8	2,2e-7	3,2e-6	5,2e-5	...	6,0	1,2e2	2,8e3	6,4e4

Motivace

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic

Jakou největší čtvercovou soustavu lineárních rovnic by vypočítal za 1 hodinu nejlepší, viz www.top500.org, počítač na světě, americký Frontier, Kramerovým pravidlem bez použití řádkových úprav, uvažujeme-li pouze instrukce sčítání, odčítání, násobení a dělení, kterých provede $1,102 \cdot 10^{18}$ za sekundu?

21 rovnic (O jednu více než Tianhe-2 v roce 2013.)

Motto

„Raději budu počítat na starém počítači novou metodou než naopak.”

Prof. Philippe Toint

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova kurzu

1. Soustavy lineárních rovnic
2. Interpolace a numerická integrace
3. Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT
4. Obyčejné a parciální diferenciální rovnice metodami konečných a hraničních prvků

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 1. přednášky: Soustavy lineárních rovnic

- Příklad: Interpolace monomiály
- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Ortogonalita (kolmost)
- Stabilní Gaussova eliminační metoda
- Stabilní a rychlé iterační metody

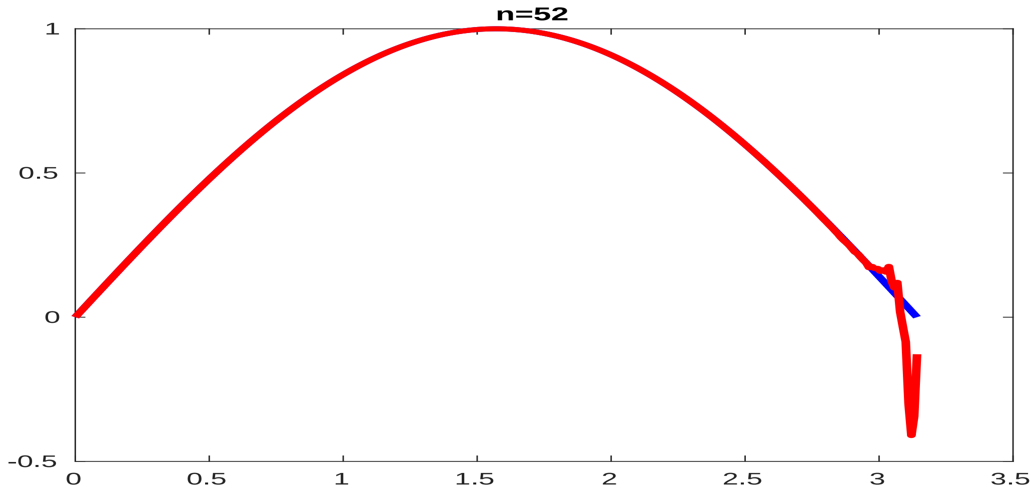
Příklad: Interpolace monomiály

Proložme $f(x) := \sin(x)$ **v bodech** $x_i := \frac{i\pi}{n+1}$**,** $i = 0, \ldots, n$ **pol.** $f_n(x) := \sum_{i=0}^{n} \alpha_i x^i$**.**

Řešíme soustavu lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & (x_0)^2 & \ldots & (x_0)^n \\ 1 & x_1 & (x_1)^2 & \ldots & (x_1)^n \\ 1 & x_2 & (x_2)^2 & \ldots & (x_2)^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & (x_n)^2 & \ldots & (x_n)^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix}.$$

Toto řešení je nestabilní (citlivé na zaokrouhlovací chyby).



Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

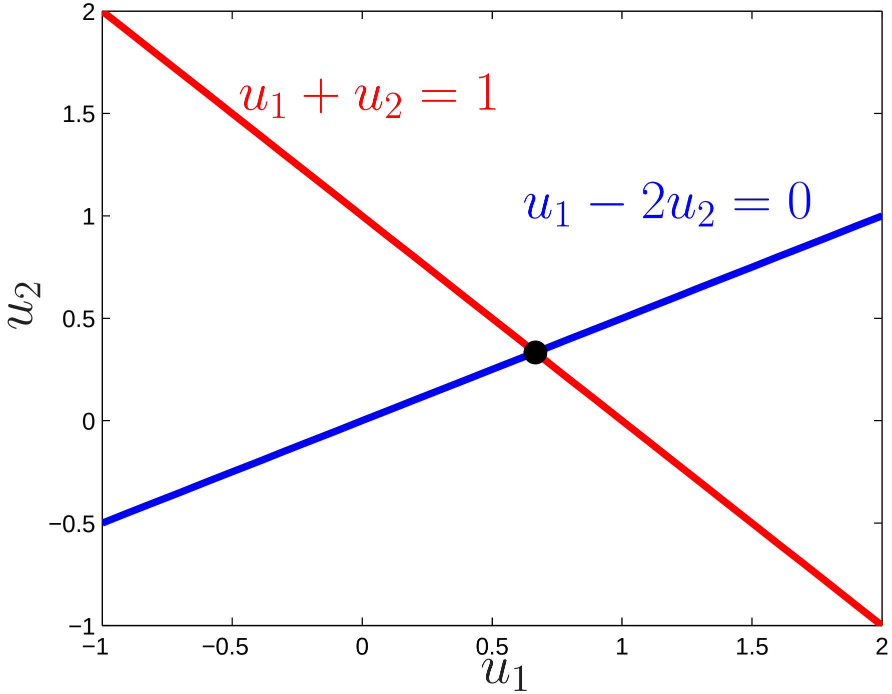
Osnova 1. přednášky: Soustavy lineárních rovnic

- Příklad: Interpolace monomiály
- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Ortogonalita (kolmost)
- Stabilní Gaussova eliminační metoda
- Stabilní a rychlé iterační metody

Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po řádcích: různoběžky — právě jedno řešení

$$\begin{aligned} u_1 &+ \quad u_2 &= 1 \\ u_1 &+ (-2)\, u_2 &= 0 \end{aligned} \qquad \text{řešení}: \; u_1 = \frac{2}{3},\; u_2 = \frac{1}{3}$$

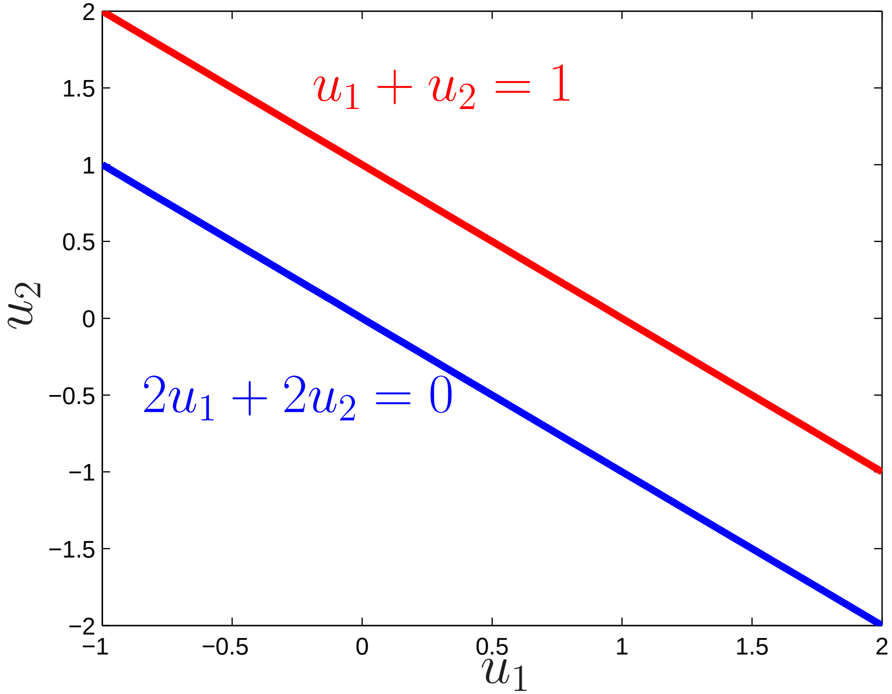


Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po řádcích: rovnoběžky — žádné řešení nebo ...

$$\begin{aligned} u_1 &+ u_2 &= 1 \\ 2\,u_1 &+ 2\,u_2 &= 0 \end{aligned}$$

nemá řešení

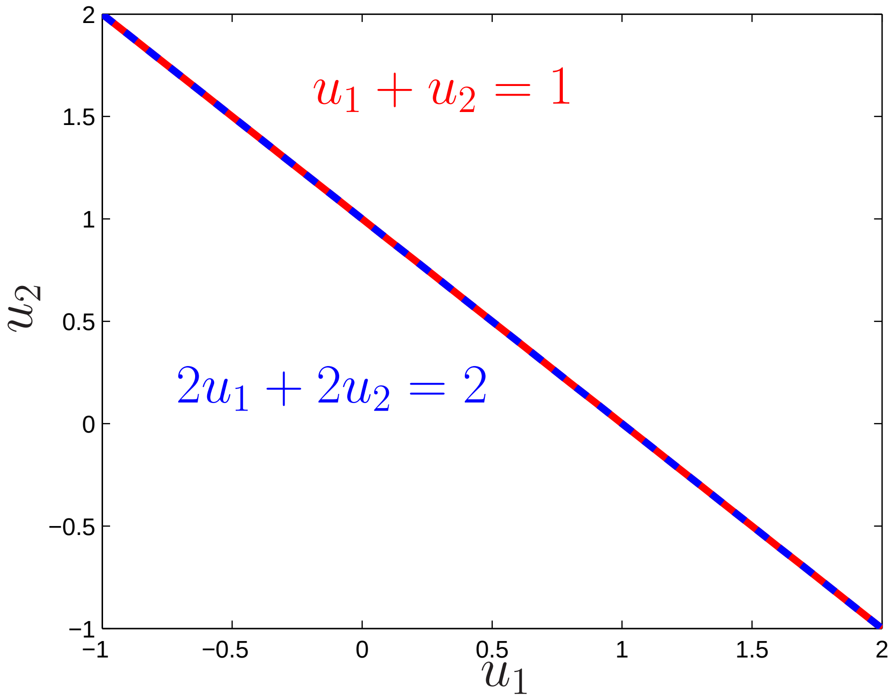


Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po řádcích: rovnoběžky — ...nebo nekonečně mnoho řešení

$$\begin{aligned} u_1 &+ u_2 &= 1 \\ 2\,u_1 &+ 2\,u_2 &= 2 \end{aligned}$$

nekonečně mnoho řešení

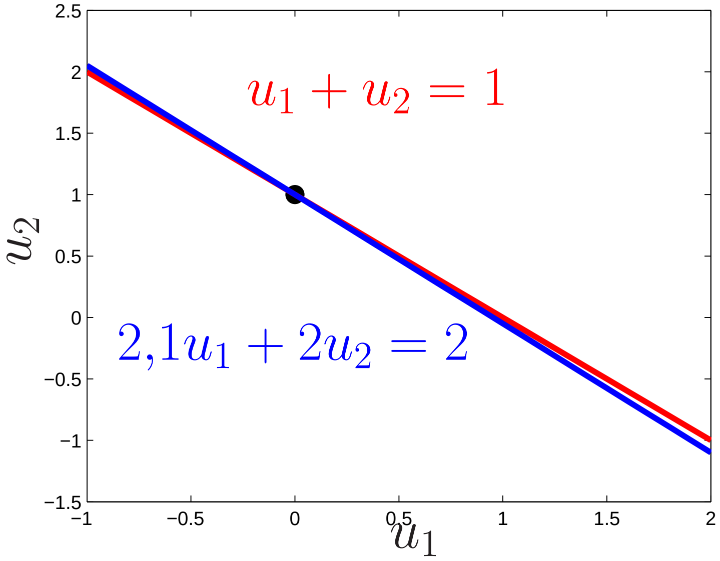


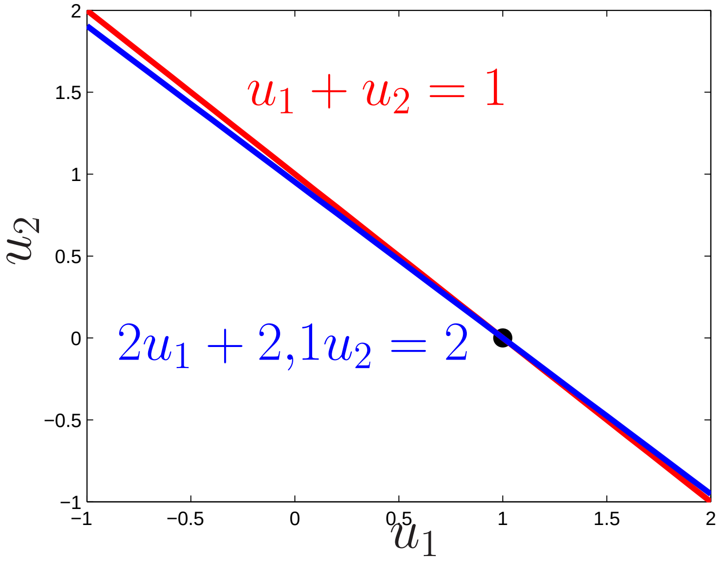
Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po řádcích: téměř rovnoběžky — nestabilní řešení

$$\begin{aligned} u_1 + u_2 &= 1 \\ 2{,}1\,u_1 + 2\,u_2 &= 2 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} u_1 &= 0 \\ u_2 &= 1 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} u_1 + u_2 &= 1 \\ 2\,u_1 + 2{,}1\,u_2 &= 2 \end{aligned} \qquad \begin{aligned} u_1 &= 1 \\ u_2 &= 0 \end{aligned}$$





Geometrie soustav lineárních rovnic

Maticový zápis

$$\begin{array}{rcrcl} 1\,u_1 & + & 1\,u_2 & = & 1 \\ 1\,u_1 & + & (-2)\,u_2 & = & 0 \end{array} \qquad \text{vektorový zápis:} \begin{pmatrix} u_1 + u_2 \\ u_1 - 2\,u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Matice soustavy $\mathbf{A}$, vektor pravých stran $\mathbf{b}$, vektor neznámých $\mathbf{u}$:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix}.$$

Zavedeme-li následující násobení matice krát vektor:

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1\,u_1 + 1\,u_2 \\ 1\,u_1 + (-2)\,u_2 \end{pmatrix},$$

dostáváme maticový zápis soustavy

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{b}.$$

Geometrie soustav lineárních rovnic

Násobení dvou vektorů (skalární součin)

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = (u_1, u_2, \ldots, u_n) \cdot (v_1, v_2, \ldots, v_n) := u_1\, v_1 + u_2\, v_2 + \ldots u_n\, v_n = \sum_{i=1}^{n} u_i\, v_i$$

Násobení matice krát vektor: po řádcích

$$\mathbf{A} \cdot \mathbf{u} = \begin{pmatrix} (a_{1,1} & a_{1,2} & \ldots & a_{1,n}) \\ (a_{2,1} & a_{2,2} & \ldots & a_{2,n}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (a_{m,1} & a_{m,2} & \ldots & a_{m,n}) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^{\mathrm{r}} \\ \mathbf{a}_2^{\mathrm{r}} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^{\mathrm{r}} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{u} := \begin{pmatrix} \mathbf{a}_1^{\mathrm{r}} \cdot \mathbf{u} \\ \mathbf{a}_2^{\mathrm{r}} \cdot \mathbf{u} \\ \vdots \\ \mathbf{a}_n^{\mathrm{r}} \cdot \mathbf{u} \end{pmatrix}$$

Geometrie soustav lineárních rovnic

Násobení matice krát vektor: po sloupcích

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{u} = \left(\begin{pmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \\ \vdots \\ a_{m,1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \\ \vdots \\ a_{m,2} \end{pmatrix} \dots \begin{pmatrix} a_{1,n} \\ a_{2,n} \\ \vdots \\ a_{m,n} \end{pmatrix}\right) \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} = \left(\mathbf{a}_1^{\mathrm{s}} \ \ \mathbf{a}_2^{\mathrm{s}} \ \ \dots \ \ \mathbf{a}_n^{\mathrm{s}}\right) \cdot \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_n \end{pmatrix} :=$$

$$:= \underbrace{u_1 \begin{pmatrix} a_{1,1} \\ a_{2,1} \\ \vdots \\ a_{m,1} \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} a_{1,2} \\ a_{2,2} \\ \vdots \\ a_{m,2} \end{pmatrix} + \dots + u_n \begin{pmatrix} a_{1,n} \\ a_{2,n} \\ \vdots \\ a_{m,n} \end{pmatrix}}_{\text{lineární kombinace sloupců}}$$

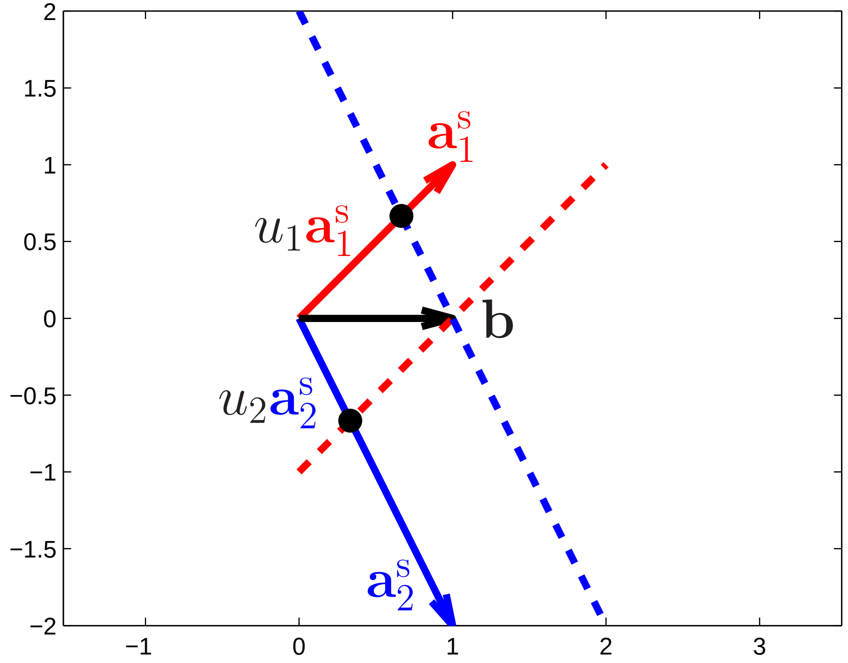
Lineární kombinace a soustavy

$$\begin{array}{rcrcl} u_1 & + & u_2 & = & 1 \\ u_1 & - & 2\,u_2 & = & 0 \end{array} \qquad \Leftrightarrow \qquad u_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po sloupcích: „lineárně nezávislé” sloupce — právě jedno řešení

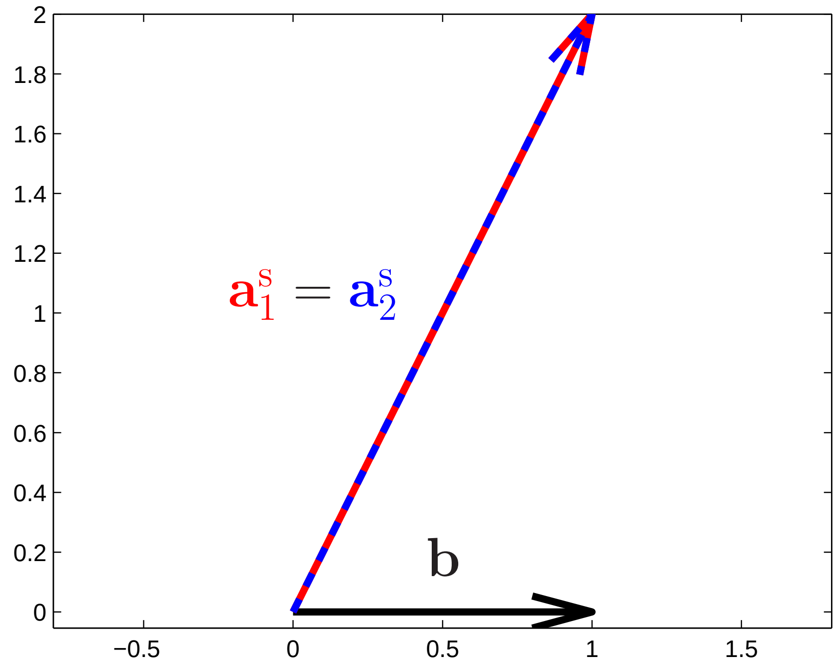
$$\begin{array}{rcrcl} u_1 & + & u_2 & = & 1 \\ u_1 & - & 2\,u_2 & = & 0 \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad \underbrace{u_1}_{=2/3}\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix} + \underbrace{u_2}_{=1/3}\begin{pmatrix}1\\-2\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}$$



Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po sloupcích: „lineárně závislé” sloupce — žádné nebo ...

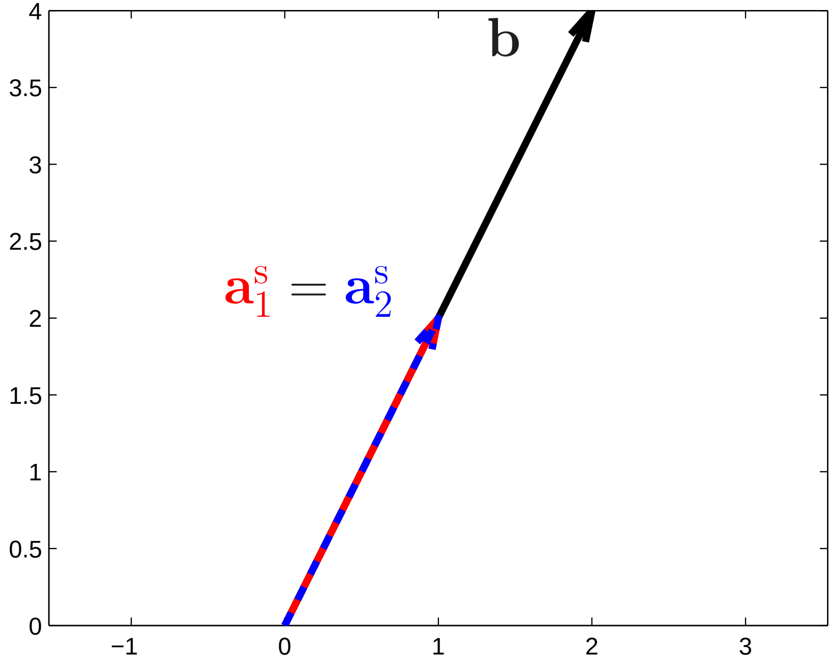
$$\begin{array}{rcrcl} u_1 & + & u_2 & = & 1 \\ 2\,u_1 & + & 2\,u_2 & = & 0 \end{array} \quad \Leftrightarrow \quad u_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$



Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po sloupcích: „lineárně závislé” sloupce — . . . mnoho řešení

$$\begin{aligned} u_1 &+ u_2 &= 2 \\ 2\,u_1 &+ 2\,u_2 &= 4 \end{aligned} \qquad \Leftrightarrow \qquad u_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} + u_2 \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 4 \end{pmatrix}$$

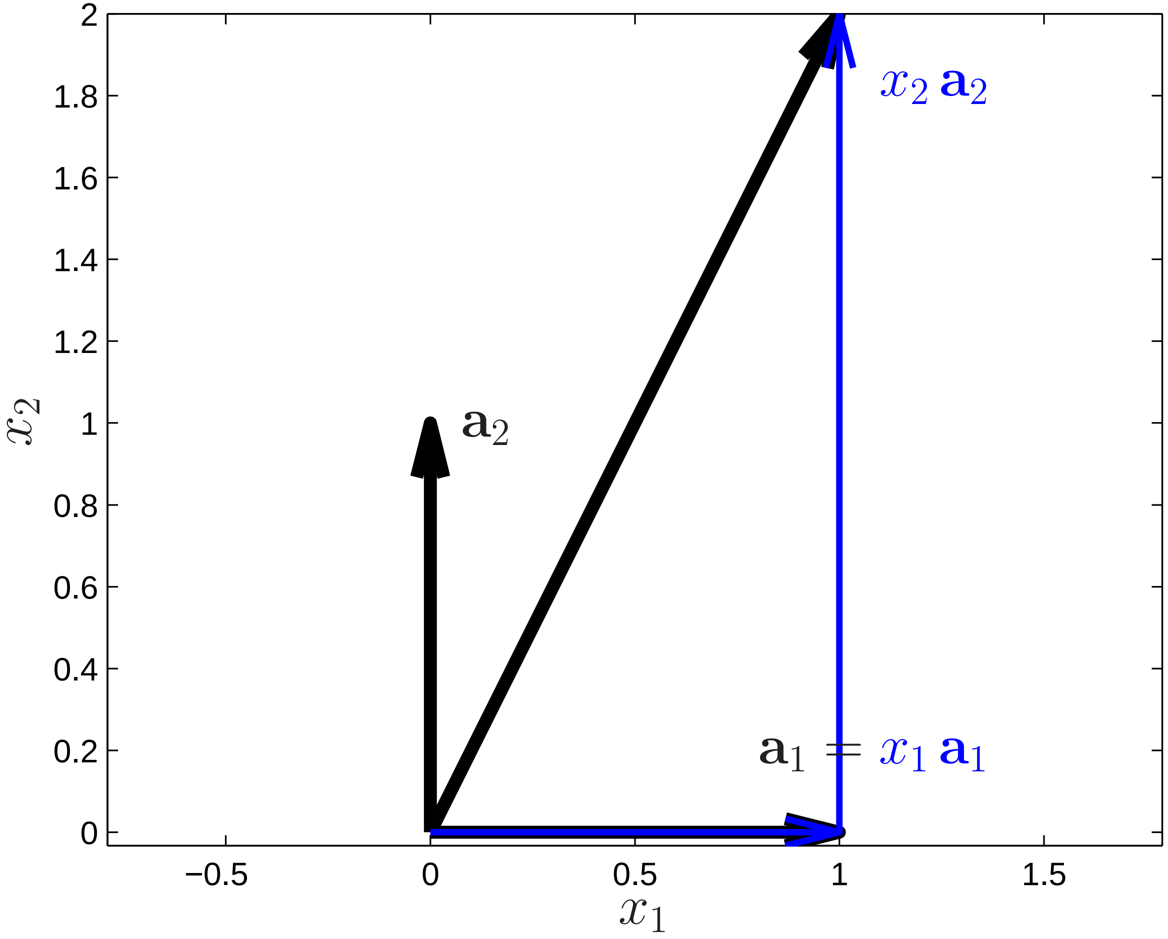


Geometrie soustav lineárních rovnic

Nejjednodušší soustavy: x_1, x_2 „řešíme” nezávisle

$$\begin{aligned} x_1 \phantom{{}+x_2} &= 1 \\ x_2 &= 2 \end{aligned}$$

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

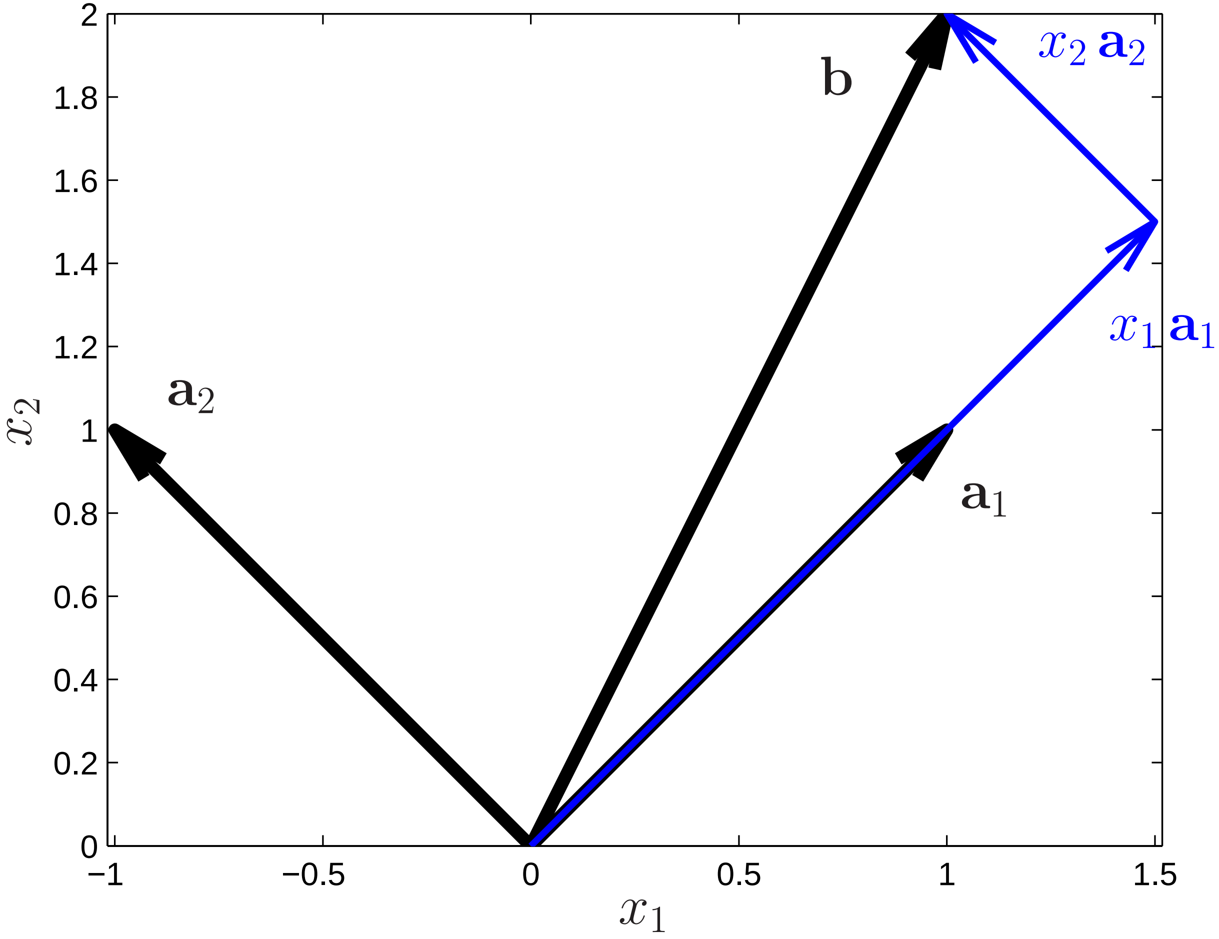


Geometrie soustav lineárních rovnic

x_1, x_2 řešíme nezávisle $\Leftrightarrow$ $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2$

$$\begin{aligned} x_1 &- x_2 = 1 \\ x_1 &+ x_2 = 2 \end{aligned}$$

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$



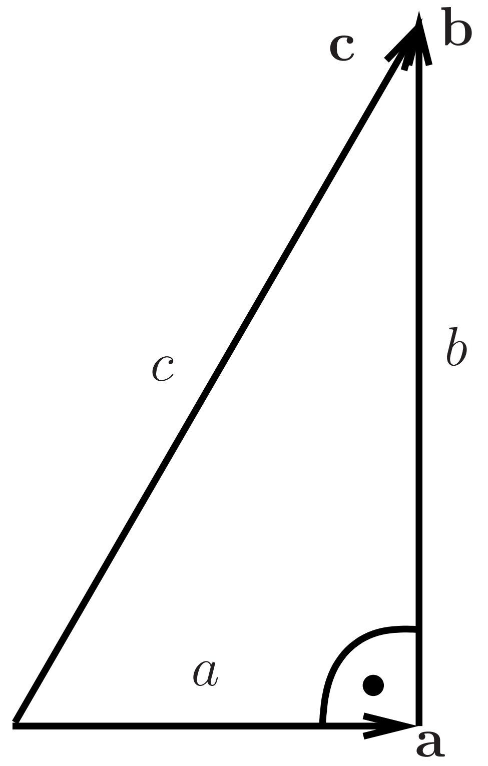
Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 1. přednášky: Soustavy lineárních rovnic

- Příklad: Interpolace monomiály
- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Ortogonalita (kolmost)
- Stabilní Gaussova eliminační metoda
- Stabilní a rychlé iterační metody

Ortogonalita (kolmost)

Kolmé (ortogonální) vektory



Pythagorova věta

$$a^2 + b^2 = c^2$$

Vektorový počet

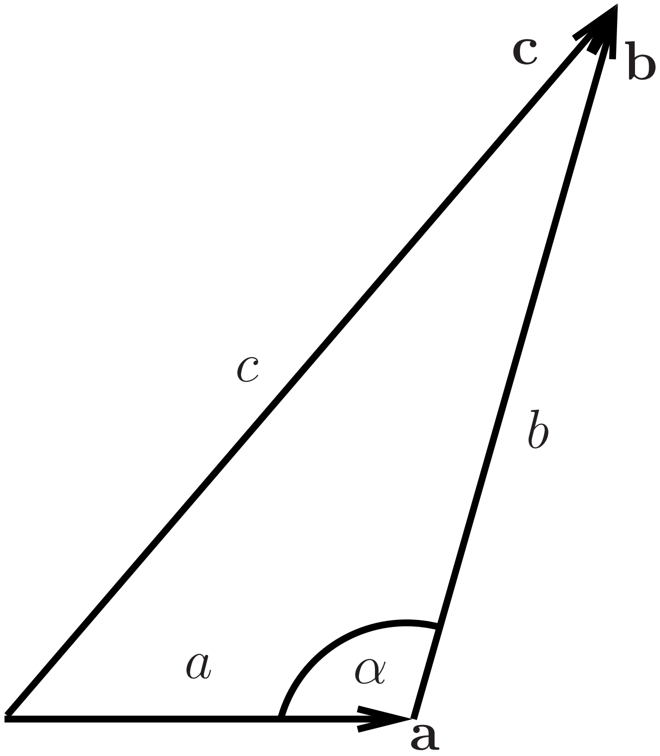
$$\mathbf{a} := \begin{pmatrix} a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} 0 \\ b \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \mathbf{a}+\mathbf{b} := \begin{pmatrix} a+0 \\ 0+b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$$

Velikost (norma) vektoru

$$c := \|\mathbf{c}\| = \left\| \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \right\| := \sqrt{a^2 + b^2}$$

Ortogonalita (kolmost)

Nekolmé vektory



Vektorový počet

$$\mathbf{a} := \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \mathbf{a}+\mathbf{b} := \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{pmatrix}$$

Kvadrát velikosti vektoru, Kosinová věta

$$\begin{aligned} c^2 = \|\mathbf{c}\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{pmatrix} \right\|^2 &= \\ &= (a_1 + b_1)^2 + (a_2 + b_2)^2 = \\ &= \underbrace{(a_1)^2 + (a_2)^2}_{=\|\mathbf{a}\|^2} + \underbrace{(b_1)^2 + (b_2)^2}_{=\|\mathbf{b}\|^2} + 2 \underbrace{(a_1 b_1 + a_2 b_2)}_{=:\mathbf{a}\cdot\mathbf{b}=\cos(\alpha)\|\mathbf{a}\|\,\|\mathbf{b}\|} \\ &= a^2 + b^2 + 2\cos(\alpha)\, a\, b \end{aligned}$$

$\alpha = \frac{\pi}{2} \iff \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} = 0$: Pythagorova $\equiv$ Kosinová věta

Ortogonalita (kolmost)

Eukleidovský skalární součin, norma, ortogonalita, ortonormalita

Bilineární forma $(.,.) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ definovaná

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$$

se nazývá **Eukleidovský skalární součin**. Ten indukuje **Eukleidovskou normu**

$$\|\mathbf{x}\| := \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}.$$

Vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ jsou **ortogonální** (v Eukl. skalárním součinu), pokud

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0,$$

a jsou **ortonormální** (v Eukl. skalárním součinu), pokud navíc

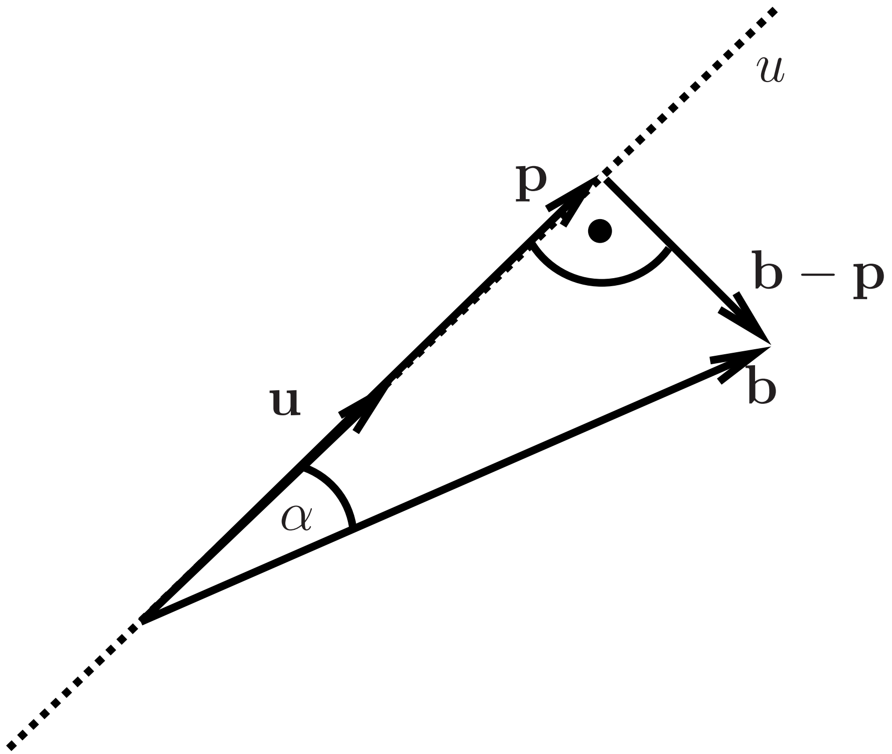
$$\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{y}\| = 1.$$

Úhel mezi vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ zobecníme takto

$$\cos \alpha = \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\|\mathbf{x}\| \, \|\mathbf{y}\|}$$

Ortogonalita (kolmost)

Projekce (ortogonální) bodu na přímku



Dáno: přímka u se směrem $\mathbf{u}$ a bod $\mathbf{b}$.

Úloha:

$$\text{Hledáme } \mathbf{p} := x\mathbf{u} : \ \mathbf{u} \perp (\mathbf{b}-\mathbf{p})$$

Tj.

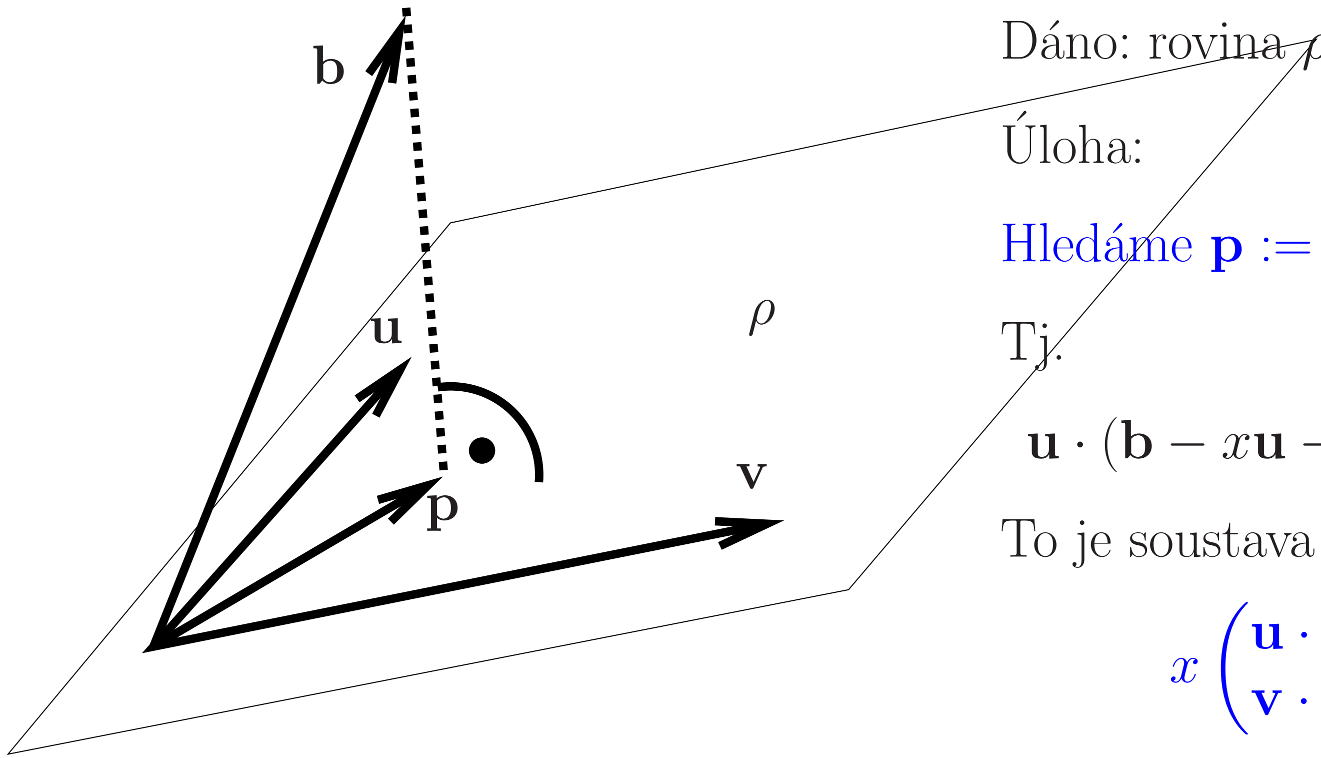
$$\mathbf{u}\cdot(\mathbf{b}-x\mathbf{u}) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad x = \frac{\mathbf{u}\cdot\mathbf{b}}{\mathbf{u}\cdot\mathbf{u}} = \cos(\alpha)\frac{\|\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{u}\|},$$

což není překvapivé:

$$\|\mathbf{p}\| = \|x\mathbf{u}\| = \left\|\cos(\alpha)\frac{\|\mathbf{b}\|}{\|\mathbf{u}\|}\mathbf{u}\right\| = \cos(\alpha)\|\mathbf{b}\|.$$

Ortogonalita (kolmost)

Projekce (ortogonální) bodu na rovinu



Dáno: rovina ρ se směry $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ a bod $\mathbf{b}$.

Úloha:

Hledáme $\mathbf{p} := x\mathbf{u} + y\mathbf{v}$: $\mathbf{u} \perp (\mathbf{b} - \mathbf{p})$ a $\mathbf{v} \perp (\mathbf{b} - \mathbf{p})$

Tj.

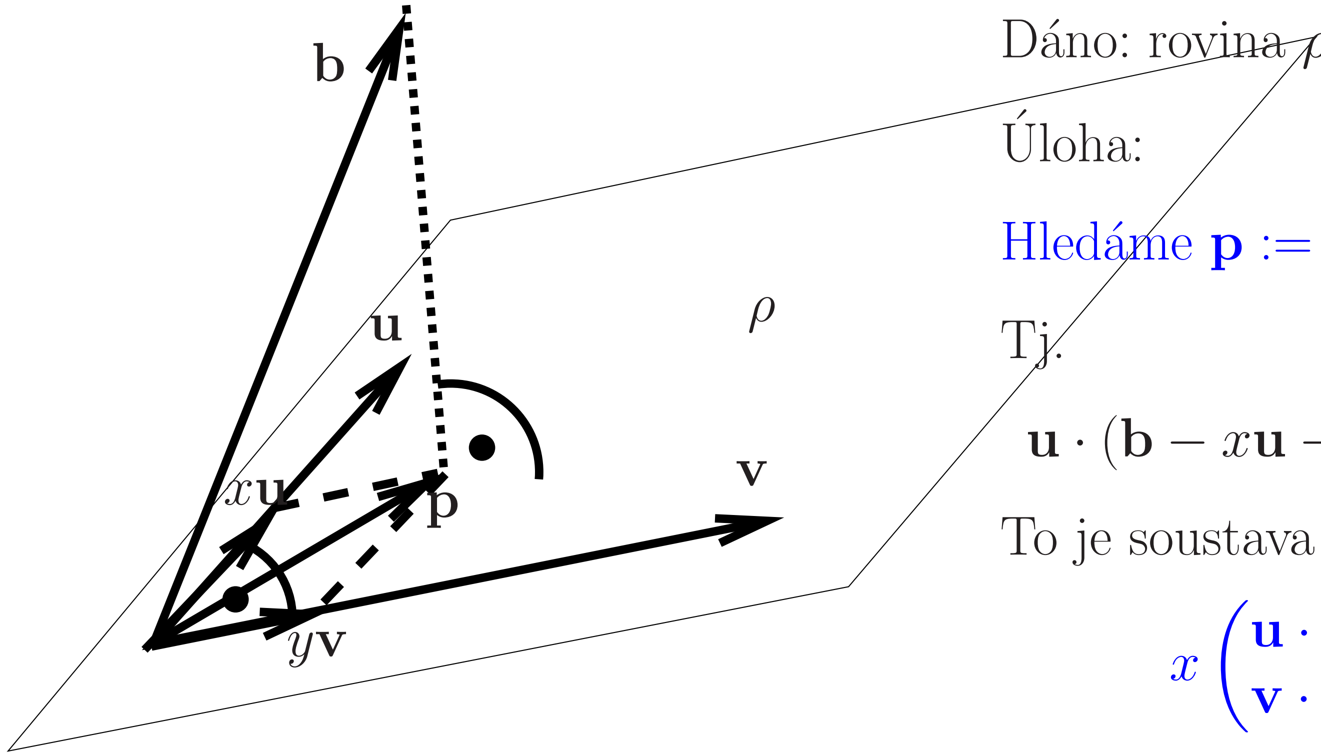
$$\mathbf{u} \cdot (\mathbf{b} - x\mathbf{u} - y\mathbf{v}) = 0 \text{ a } \mathbf{v} \cdot (\mathbf{b} - x\mathbf{u} - y\mathbf{v}) = 0.$$

To je soustava 2 lineárních rovnic o 2 neznámých:

$$x \begin{pmatrix} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \end{pmatrix}.$$

Ortogonalita (kolmost)

Projekce (ortogonální) bodu na rovinu



Dáno: rovina ρ se směry $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ a bod $\mathbf{b}$.

Úloha:

Hledáme $\mathbf{p} := x\mathbf{u} + y\mathbf{v}$: $\mathbf{u} \perp (\mathbf{b} - \mathbf{p})$ a $\mathbf{v} \perp (\mathbf{b} - \mathbf{p})$

Tj.

$$\mathbf{u} \cdot (\mathbf{b} - x\mathbf{u} - y\mathbf{v}) = 0 \text{ a } \mathbf{v} \cdot (\mathbf{b} - x\mathbf{u} - y\mathbf{v}) = 0.$$

To je soustava 2 lineárních rovnic o 2 neznámých:

$$x \begin{pmatrix} \mathbf{u} \cdot \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{u} \end{pmatrix} + y \begin{pmatrix} \mathbf{u} \cdot \mathbf{v} \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{u} \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{v} \cdot \mathbf{b} \end{pmatrix}.$$

$\mathbf{u} \perp \mathbf{v}$: Projekce na ρ je součtem projekcí na u a v,

$$\mathbf{p} = \underbrace{\frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{b}}{\mathbf{u} \cdot \mathbf{u}}}_{=x} \mathbf{u} + \underbrace{\frac{\mathbf{v} \cdot \mathbf{b}}{\mathbf{v} \cdot \mathbf{v}}}_{=y} \mathbf{v}.$$

Ortogonalita (kolmost)

Ortogonální/ortonormální systém

Vektory $\mathbf{v}_1, \ldots, \mathbf{v}_m \in \mathbf{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ tvoří **ortogonální systém (bázi** pro $n = m$**)**, pokud

$$(\mathbf{v}_i, \mathbf{v}_j) = 0 \quad \text{pro } i \neq j.$$

Pokud navíc $\|\mathbf{v}_i\| = 1$, pak se jedná o **ortonormální systém (bázi)**.

Příklad: Kanonická báze $\mathbb{R}^2$ tvoří ortonormální systém.

Uvažujme kanonickou bázi prostoru $\mathbb{R}^2$

$$E := (\mathbf{e}_1 := (1, 0), \mathbf{e}_2 := (0, 1))\,.$$

Pak

$$(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) = 1 \cdot 0 + 0 \cdot 1 = 0 = (\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_1), \quad \|\mathbf{e}_1\| = \sqrt{1^2 + 0^2} = 1, \quad \|\mathbf{e}_2\| = \sqrt{0^2 + 1^2} = 1.$$

Ortogonalita (kolmost)

„Ortogonalizujte" bázi $E := (\mathbf{e}_1 := (1,1,1), \mathbf{e}_2 := (1,-1,1), \mathbf{e}_3 := (-1,1,1))$**.**

Termín „ortogonalizujte" znamená nalézt ortogonální bázi $F := (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3)$ tak, že

$$1.\ \mathbf{f}_1 \in \langle \mathbf{e}_1 \rangle, \quad 2.\ \mathbf{f}_2 \in \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle, \quad 3.\ \mathbf{f}_3 \in \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \rangle.$$

Ad 1. $\mathbf{f}_1 := \mathbf{e}_1 = (1,1,1)$.

Ad 2. $\mathbf{f}_2 := \mathbf{e}_2 - \alpha \mathbf{f}_1$: $\mathbf{f}_2 \perp \mathbf{f}_1$, tj.

$$0 = (\mathbf{f}_2, \mathbf{f}_1) = \mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{f}_1 - \alpha \mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_1 \implies \alpha = \frac{\mathbf{e}_2 \cdot \mathbf{f}_1}{\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_1} = \frac{(1,-1,1)\cdot(1,1,1)}{(1,1,1)\cdot(1,1,1)} = \frac{1}{3},$$

a tedy $\mathbf{f}_2 = (1,-1,1) - \frac{1}{3}(1,1,1) = \left(\frac{2}{3}, -\frac{4}{3}, \frac{2}{3}\right)$.

Ad 3. $\mathbf{f}_3 := \mathbf{e}_3 - \beta \mathbf{f}_1 - \gamma \mathbf{f}_2$: $\mathbf{f}_3 \perp \mathbf{f}_1$ a $\mathbf{f}_3 \perp \mathbf{f}_2$, tj.

$$0 = (\mathbf{f}_3, \mathbf{f}_1) = \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{f}_1 - \beta \mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_1 \implies \beta = \frac{\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{f}_1}{\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_1} = \frac{(-1,1,1)\cdot(1,1,1)}{(1,1,1)\cdot(1,1,1)} = \frac{1}{3},$$

$$0 = (\mathbf{f}_3, \mathbf{f}_2) = \mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{f}_2 - \gamma \mathbf{f}_2 \cdot \mathbf{f}_2 \implies \gamma = \frac{\mathbf{e}_3 \cdot \mathbf{f}_2}{\mathbf{f}_2 \cdot \mathbf{f}_2} = \frac{(-1,1,1)\cdot\left(\frac{2}{3}, -\frac{4}{3}, \frac{2}{3}\right)}{\left(\frac{2}{3}, -\frac{4}{3}, \frac{2}{3}\right)\cdot\left(\frac{2}{3}, -\frac{4}{3}, \frac{2}{3}\right)} = -\frac{1}{2},$$

a tedy $\mathbf{f}_3 = (-1,1,1) - \frac{1}{3}(1,1,1) + \frac{1}{2}\left(\frac{2}{3}, -\frac{4}{3}, \frac{2}{3}\right) = (-1,0,1)$.

Ortogonalita (kolmost)

Gram–Schmidtův ortogonalizační/ortonormalizační algoritmus

Mějme bázi $E := (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$ prostoru $\mathbb{R}^n$. Ortogonalizujme/ortonormalizujme ji.

$$\mathbf{f}_1 := \mathbf{e}_1, \quad \mathbf{q}_1 := \frac{1}{\|\mathbf{f}_1\|}\mathbf{f}_1,$$

$$\mathbf{f}_i := \mathbf{e}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij}\mathbf{f}_j, \text{ kde } \alpha_{ij} = \frac{(\mathbf{e}_i, \mathbf{f}_j)}{\|\mathbf{f}_j\|^2}, \ \mathbf{q}_i := \frac{1}{\|\mathbf{f}_i\|}\mathbf{f}_i, \text{ pro } i \in \{2, \dots, n\}.$$

Výsledkem je ortog. báze $F := (\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_n)$, resp. ortonorm. báze $Q := (\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$.

Příklad: Ortonormalizujte $E := (\mathbf{e}_1 := (1, 2), \mathbf{e}_2 := (1, 1))$.

$$\mathbf{f}_1 := \mathbf{e}_1 = (1, 2), \quad \mathbf{q}_1 = \frac{1}{\|(1, 2)\|}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{1^2 + 2^2}}(1, 2) = \frac{1}{\sqrt{5}}(1, 2),$$

$$\alpha_{21} = \frac{(\mathbf{e}_2, \mathbf{f}_1)}{\|\mathbf{f}_1\|^2} = \frac{(1, 1) \cdot (1, 2)}{5} = \frac{3}{5}, \quad \mathbf{f}_2 := \mathbf{e}_2 - \alpha_{21}\mathbf{f}_1 = (1, 1) - \frac{3}{5}(1, 2) = \frac{1}{5}(2, -1),$$

$$\mathbf{q}_2 := \frac{1}{\frac{1}{5}\|(2, -1)\|}(2, -1) = \frac{1}{\sqrt{5}}(2, -1).$$

Ortogonalita (kolmost)

Ortogonální matice

Čtvercová **matice** $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, která splňuje

$$\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} = \mathbf{I}, \quad \text{a tedy } \mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T,$$

se nazývá **ortogonální**. Její sloupce tvoří ortonormální systém.

Příklad: Ověřte, že matice $\mathbf{Q} := (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ z předchozího příkladu je ortogonální.

$$\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{5} \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 5 \end{pmatrix} = \mathbf{I}.$$

Ortogonalita (kolmost)

Soustavy s ortogonální maticí

Soustava s ortogonální matici $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ a pravou stranu $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ je snadno řešitelná

$$\mathbf{Q} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{x} = \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{b}.$$

Příklad: Vypočtěte souřadnice v $:= (1,1)$ **v ortonormální bázi** $Q := (\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$**, kde** $\mathbf{q}_1 := \frac{1}{\sqrt{5}}(1,2)$**,** $\mathbf{q}_2 := \frac{1}{\sqrt{5}}(2,-1)$**.**

Hledáme $\boldsymbol{\alpha} := (\alpha_1, \alpha_2) \in \mathbb{R}^2$:

$$\alpha_1 \mathbf{q}_1 + \alpha_2 \mathbf{q}_2 = \mathbf{v} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\alpha} = \mathbf{v}, \text{ kde } \mathbf{Q} := \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & -1 \end{pmatrix}$$

je ortogonální matice. Řešením je

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{v}, \quad \text{t.j. } \alpha_1 = \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{v} = \frac{3}{\sqrt{5}}, \quad \alpha_2 = \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{\sqrt{5}}.$$

Ortogonalita (kolmost)

Ortogonální transformace zachovává velikosti vektorů i úhly

Uvažujme lineární zobrazení s ortogonální maticí $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Pro lib. $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ platí:

- normy (velikosti) vektorů jsou zachovány

$$\|\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}\| = \sqrt{\mathbf{x}^T\cdot\mathbf{Q}^T\cdot\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}} = \sqrt{\mathbf{x}^T\cdot\mathbf{x}} = \|\mathbf{x}\|,$$

- hodnota skalárního součinu vektorů je zachována

$$(\mathbf{Q}\cdot\mathbf{x}, \mathbf{Q}\cdot\mathbf{y}) = \mathbf{x}^T\cdot\mathbf{Q}^T\cdot\mathbf{Q}\cdot\mathbf{y} = (\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

Připomeňme, že úhel α mezi vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y}$ jsme definovali pomocí $\cos\alpha = \frac{(\mathbf{x},\mathbf{y})}{\|\mathbf{x}\|\,\|\mathbf{y}\|}$, tedy ortogonální transformace zachovává úhly mezi vektory.

Důsledek: „Ortogonální transformace = rotace + zrcadlení"

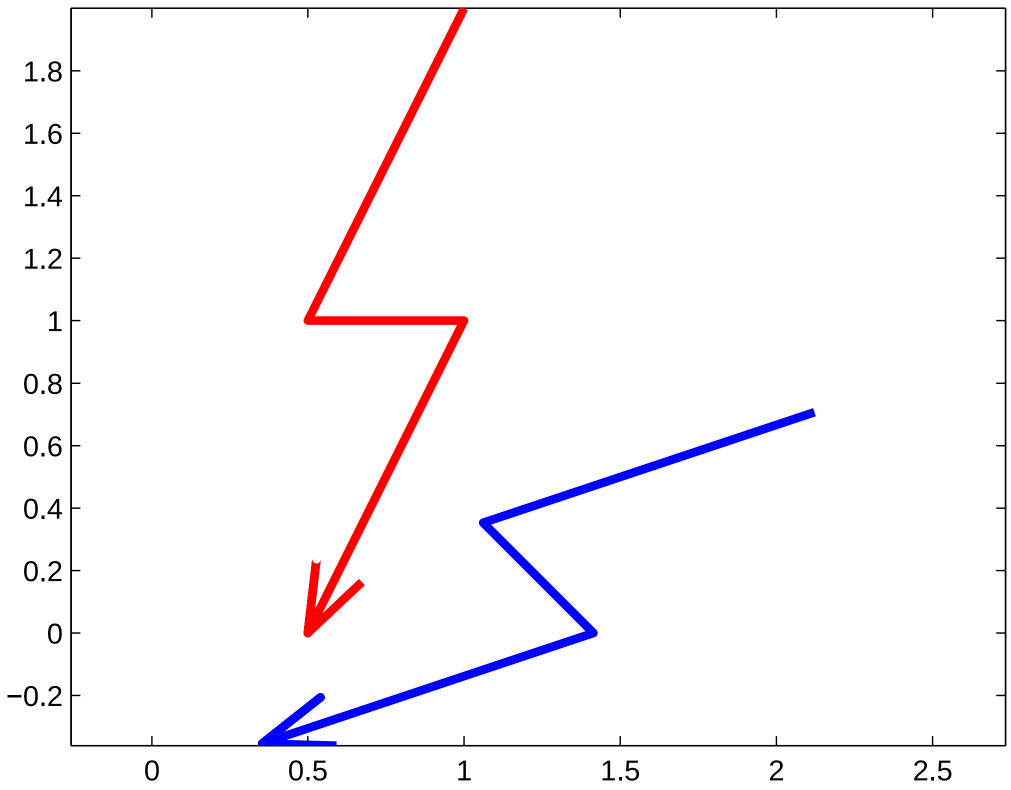
Každou ortogonální matici lze rozložit na konečný součin

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_n \cdots \mathbf{Q}_1,$$

kde jednotlivé faktory jsou buď matice rovinné rotace, nebo matice zrcadlení.

Ortogonalita (kolmost)

Příklad: Matice rovinné rotace je ortogonální.

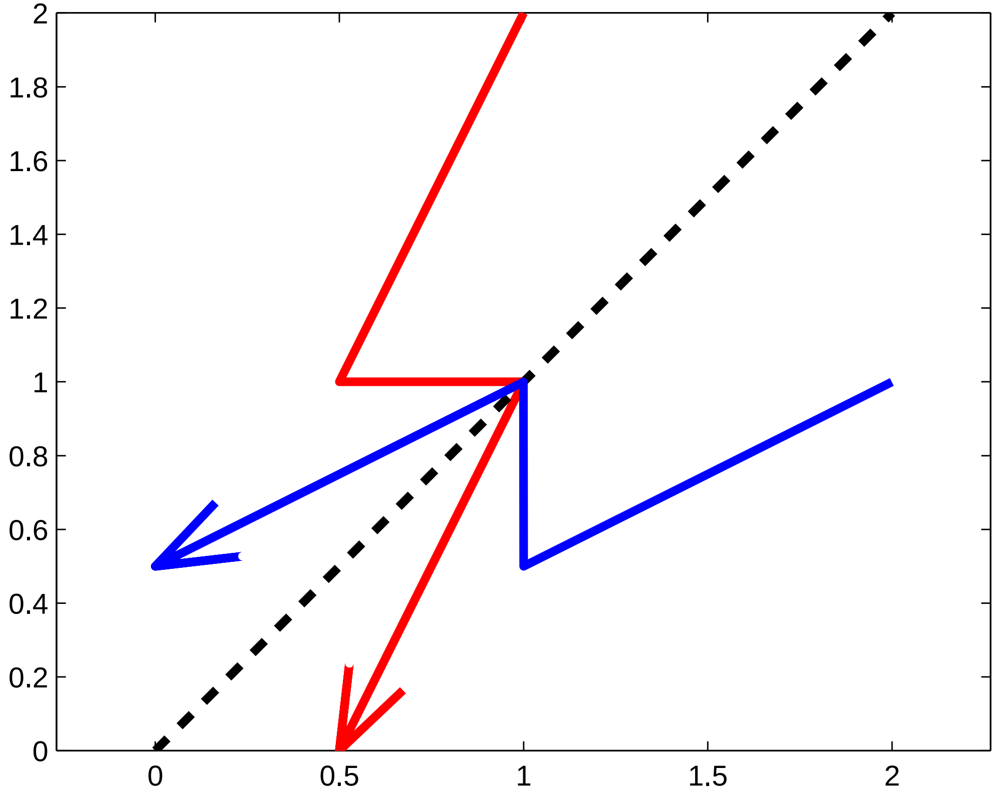


$$\mathbf{y} := \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x} := \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \cdot \mathbf{x}$$

$$\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha \\ -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos^2\alpha + \sin^2\alpha & 0 \\ 0 & \sin^2\alpha + \cos^2\alpha \end{pmatrix} = \mathbf{I}.$$

Ortogonalita (kolmost)

Příklad: Matice zrcadlení podle přímky (roviny) je ortogonální.



$$\mathbf{y} := \mathbf{Q} \cdot \mathbf{x} := \left(\mathbf{I} - 2\frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T}{\|\mathbf{n}\|^2}\right) \cdot \mathbf{x},$$

kde $\mathbf{n}$ je normála k přímce (rovině).

$$\mathbf{Q}^T \cdot \mathbf{Q} = \left(\mathbf{I} - 2\frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T}{\|\mathbf{n}\|^2}\right)^T \cdot \left(\mathbf{I} - 2\frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T}{\|\mathbf{n}\|^2}\right) = \mathbf{I} - 4\frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}^T}{\|\mathbf{n}\|^2} + 4\frac{\mathbf{n} \cdot \overbrace{(\mathbf{n}^T \cdot \mathbf{n})}^{\|\mathbf{n}\|^2} \cdot \mathbf{n}^T}{\|\mathbf{n}\|^4} = \mathbf{I}.$$

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 1. přednášky: Soustavy lineárních rovnic

- Příklad: Interpolace monomiály
- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Ortogonalita (kolmost)
- Stabilní Gaussova eliminační metoda
- Stabilní a rychlé iterační metody

Stabilní Gaussova eliminační metoda

„Exploze" zaokrouhlovací chyby v Gaussově eliminaci

Proveďme Gaussovu eliminaci (LU rozklad) na následující matici

$$
(\mathbf{A}|\mathbf{I}) := \left(\begin{array}{ccccc|ccccc}
1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{array}\right) \to \left(\begin{array}{ccccc|ccccc}
1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1 & -1 & 0 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1 & -1 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1 & -1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1
\end{array}\right).
$$

Nyní zaveďme chybu 0.1 do prvku $\mathbf{A}_{11}$. Chyba se při eliminaci takto zvětšuje:

$$
\left(\begin{array}{ccccc|ccccc}
1.1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
-1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\
0 & 0 & 0 & -1 & 2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1
\end{array}\right) \to \left(\begin{array}{ccccc|ccccc}
1.1 & -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 1.2 & -1.1 & 0 & 0 & 1 & 1.1 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 1.3 & -1.2 & 0 & 1 & 1.1 & 1.2 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 1.4 & -1.3 & 1 & 1.1 & 1.2 & 1.3 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 1.5 & 1 & 1.1 & 1.2 & 1.3 & 1.4
\end{array}\right).
$$

Stabilní Gaussova eliminační metoda

Householderův eliminační krok

Pro vektor (část pivotovaného sloupce) $\mathbf{v} \in \mathbb{R}^n$ hledáme matici zrcadlení $\mathbf{Q}_\mathbf{v}$ tak, že

$$\mathbf{Q}_\mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = \begin{pmatrix} \|\mathbf{v}\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \text{např. } \mathbf{n}_\mathbf{v} := \begin{pmatrix} v_1 - \|\mathbf{v}\| \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q}_\mathbf{v} := \mathbf{I} - 2\frac{\mathbf{n}_\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}_\mathbf{v}^T}{\|\mathbf{n}_\mathbf{v}\|^2}.$$

Stabilní Gauss–Householderova eliminace

Místo Gaussových eliminačních kroků, které (bez permutací) vedou na dolní trojúhelníkovou matici, provádíme Householderovy zrcadlení

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow[\mathbf{v}:=(2,-1,0)^T]{\mathbf{Q}_\mathbf{v}} \begin{pmatrix} 2.24 & -1.79 & 0.45 \\ 0 & -1.34 & 0.89 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \xrightarrow[\mathbf{v}:=(-1.34,-1)^T]{\mathbf{Q}_\mathbf{v}} \begin{pmatrix} 2.24 & -1.79 & 0.45 \\ 0 & 1.67 & -1.91 \\ 0 & 0 & 1.07 \end{pmatrix}.$$

Dostáváme výpočetně náročnější, avšak stabilní variantu Gaussovy eliminace.

Stabilní Gaussova eliminační metoda

Zaokrouhlovací chyba v Gauss–Householderově eliminaci „neexploduje".

Proveďme Gauss–Householderovu eliminaci (QU rozklad) na následující matici

$$\mathbf{A} := \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1.41 & -2.12 & 0.71 & 0 & 0 \\ 0 & 1.22 & -2.04 & 0.82 & 0 \\ 0 & 0 & 1.15 & -2.02 & 0.87 \\ 0 & 0 & 0 & 1.12 & -2.01 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.45 \end{pmatrix}.$$

Nyní zaveďme chybu 0.1 do prvku $\mathbf{A}_{11}$. Chyba se při eliminaci nezvětšuje:

$$\begin{pmatrix} 1.1 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} 1.49 & -2.09 & 0.67 & 0 & 0 \\ 0 & 1.29 & -2.02 & 0.78 & 0 \\ 0 & 0 & 1.21 & -2.01 & 0.83 \\ 0 & 0 & 0 & 1.17 & -2.00 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0.56 \end{pmatrix}.$$

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 1. přednášky: Soustavy lineárních rovnic

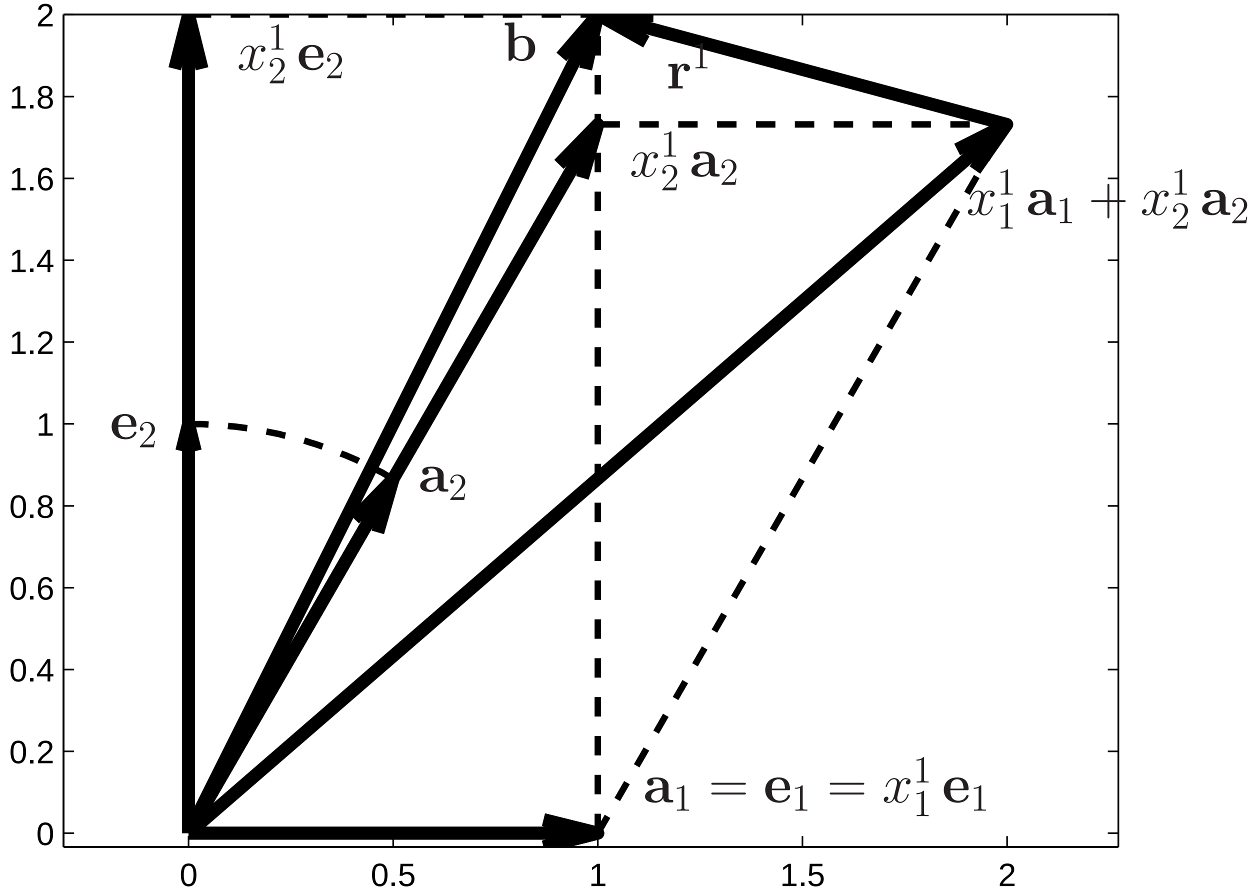
- Příklad: Interpolace monomiály
- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Ortogonalita (kolmost)
- Stabilní Gaussova eliminační metoda
- Stabilní a rychlé iterační metody

Stabilní a rychlé iterační metody

Přibližné řešení soustav Richardsonovou metodou — 1. iterace

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix}\cos\alpha\\ \sin\alpha\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

$\mathbf{x}^0 := \mathbf{0}$
$\mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - x_1^0\,\mathbf{a}_1 - x_2^0\,\mathbf{a}_2$
$k := 0$
while $\|\mathbf{r}^k\|/\|\mathbf{r}^0\| > \varepsilon$ **do**
  $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \mathbf{r}^k$
  $\mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2$
  $k := k+1$
end while
$\mathbf{x}^k$ je přibližné řešení

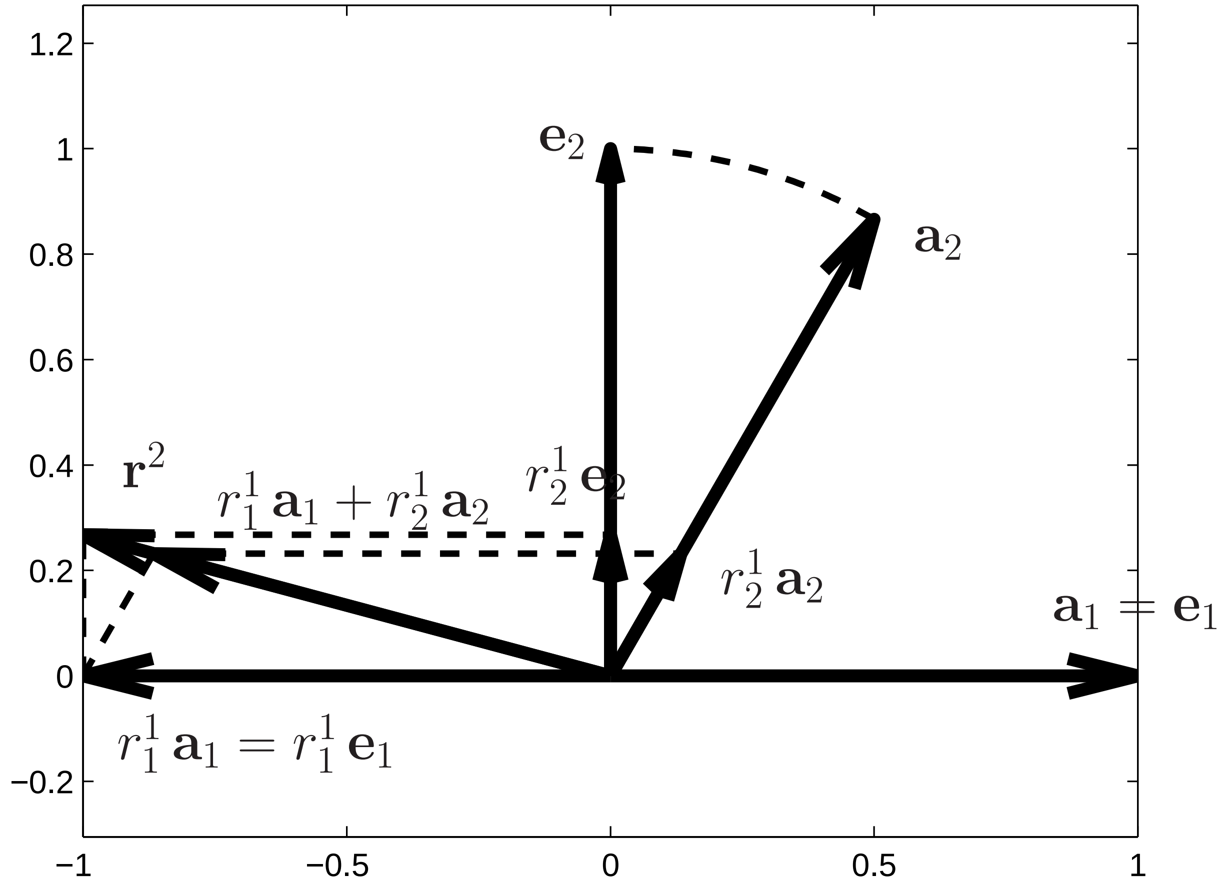


Stabilní a rychlé iterační metody

Přibližné řešení soustav Richardsonovou metodou — 2. iterace

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix}\cos\alpha\\ \sin\alpha\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

$\mathbf{x}^0 := \mathbf{0}$
$\mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - x_1^0\,\mathbf{a}_1 - x_2^0\,\mathbf{a}_2$
$k := 0$
while $\|\mathbf{r}^k\|/\|\mathbf{r}^0\| > \varepsilon$ **do**
  $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \mathbf{r}^k$
  $\mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2$
  $k := k+1$
end while
$\mathbf{x}^k$ je přibližné řešení

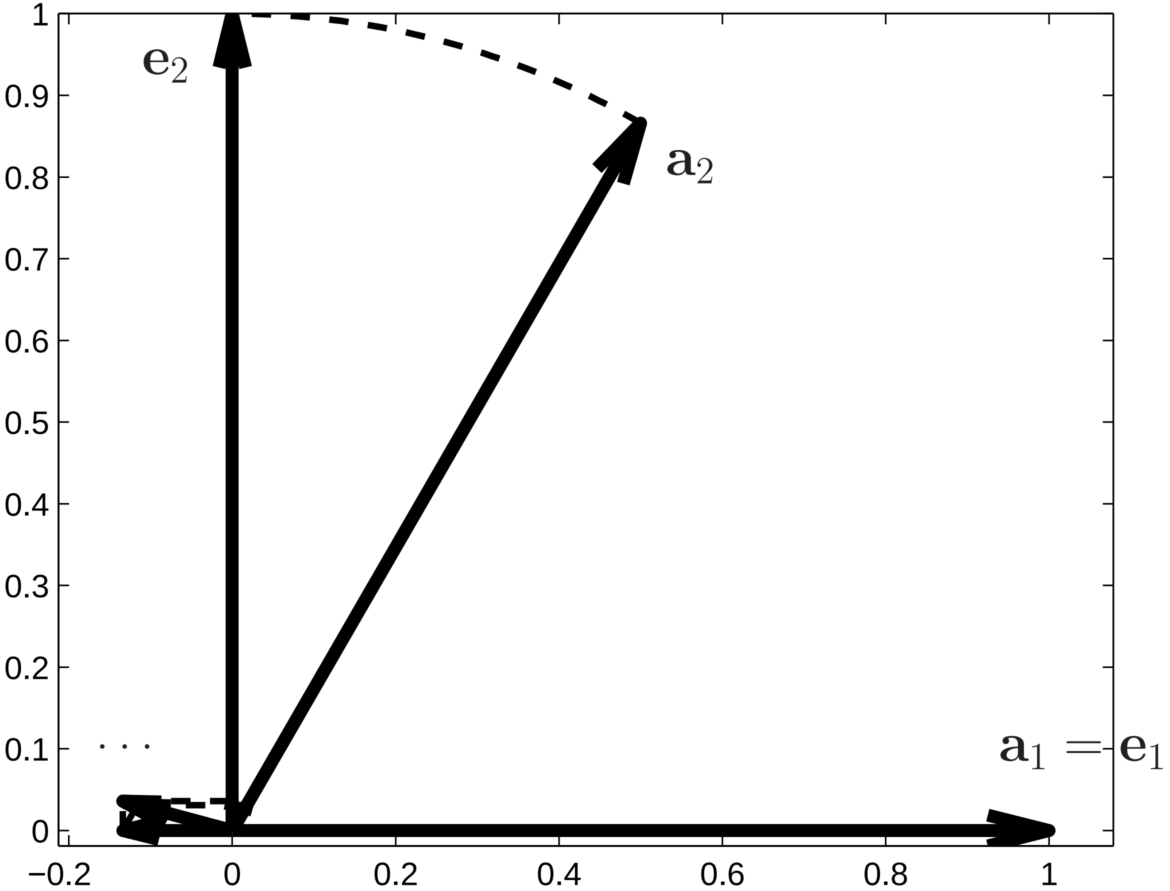


Stabilní a rychlé iterační metody

Přibližné řešení soustav Richardsonovou metodou — 3. iterace

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

$\mathbf{x}^0 := \mathbf{0}$
$\mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - x_1^0\,\mathbf{a}_1 - x_2^0\,\mathbf{a}_2$
$k := 0$
while $\|\mathbf{r}^k\|/\|\mathbf{r}^0\| > \varepsilon$ **do**
  $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \mathbf{r}^k$
  $\mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2$
  $k := k+1$
end while
$\mathbf{x}^k$ je přibližné řešení



Stabilní a rychlé iterační metody

Analýza konvergence Richardsonovy metody

$$\mathbf{a}_1 := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \ \mathbf{a}_2 := \begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix} : \quad \begin{aligned} \mathbf{r}^{k+1} &= \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2 \\ &= \mathbf{b} - \left(x_1^k + r_1^k\right)\mathbf{a}_1 - \left(x_2^k + r_2^k\right)\mathbf{a}_2 \\ &= \mathbf{r}^k - r_1^k\,\mathbf{a}_1 - r_2^k\,\mathbf{a}_2 \\ &= r_2^k \begin{pmatrix} -\cos\alpha \\ 1 - \sin\alpha \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{r}^{k+1}\|^2 = \mathbf{r}^{k+1}\cdot\mathbf{r}^{k+1} = \left(r_2^k\right)^2 \underbrace{\left[\cos^2\alpha + (1-\sin\alpha)^2\right]}_{=2(1-\sin\alpha)=:K_\alpha} \le \|\mathbf{r}^k\|^2\,K_\alpha$$

Metoda konverguje pro $\alpha \in (\pi/6, 5\pi/6) \cup (-5\pi/6, \pi/6)$: $\frac{\|\mathbf{r}^{k+1}\|}{\|\mathbf{r}^k\|} \le \sqrt{2(1-\sin\alpha)} < 1.$

Přesnosti ε je dosaženo v $k \ge \log\varepsilon / \log\sqrt{K_\alpha}$ iteracích.

Zpřesnění řešení o 1 řád vyžaduje konstantní počet iterací.

Stabilní a rychlé iterační metody

Soustava lin. rovnic s spd maticí jako minimalizace kvadratické funkce

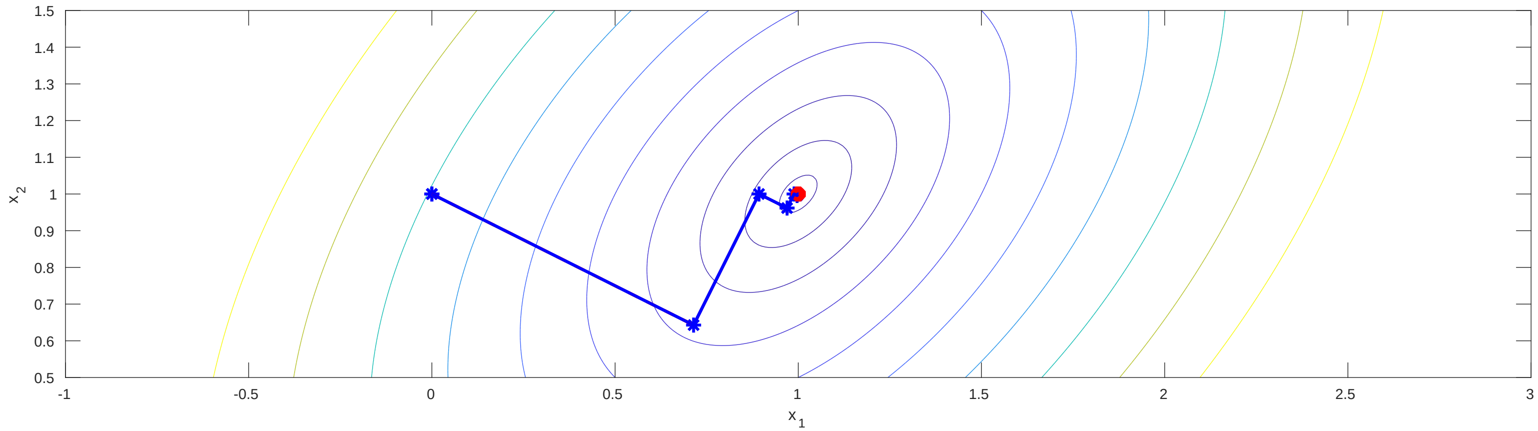
Soustava n lineárních rovnic o n neznámých

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

kde $\mathbf{A}$ je symetrická pozitivně-definitní (spd) matice, je ekvivalentní minimalizaci

$$\mathbf{x} := \arg\min_{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{y}), \quad \text{kde} \quad f(\mathbf{y}) := \frac{1}{2}\mathbf{y}^T\mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{b}^T\mathbf{y}.$$

Metoda největšího spádu



Stabilní a rychlé iterační metody

Soustava lin. rovnic s spd maticí jako minimalizace kvadratické funkce

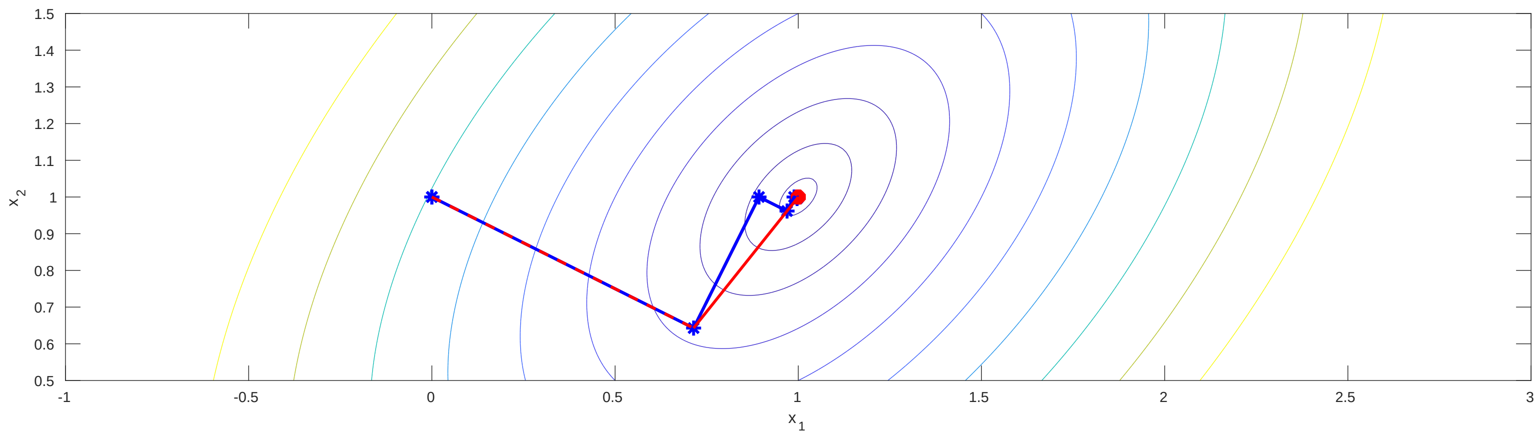
Soustava n lineárních rovnic o n neznámých

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

kde $\mathbf{A}$ je symetrická pozitivně-definitní (spd) matice, je ekvivalentní minimalizaci

$$\mathbf{x} := \arg\min_{\mathbf{y}\in\mathbb{R}^n} f(\mathbf{y}), \quad \text{kde} \quad f(\mathbf{y}) := \frac{1}{2}\mathbf{y}^T\mathbf{A}\mathbf{y} - \mathbf{b}^T\mathbf{y}.$$

Metoda největšího spádu vers. metoda sdružených gradientů



Stabilní a rychlé iterační metody

Krylovův podprostor

$$\mathcal{K}^k := \mathcal{K}^k(\mathbf{A}, \mathbf{r}^0) := \operatorname{span}\{\mathbf{r}^0, \mathbf{A}\,\mathbf{r}^0, \ldots, \mathbf{A}^k\,\mathbf{r}^0\},$$

kde $\mathbf{x}^0 \in \mathbb{R}^n$ je počáteční aproximace (typicky $\mathbf{x}^0 := \mathbf{0}$) a $\mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - \mathbf{A}\,\mathbf{x}^0$ je reziduum.

Metoda sdružených gradientů je Ritz-Galerkinova projekce na $\mathcal{K}^k$

$$\mathbf{x}^{k+1} := \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{y} \in \mathbf{x}^0 + \mathcal{K}^k(\mathbf{A},\mathbf{r}^0)} f(\mathbf{y}) = \operatorname*{arg\,min}_{\mathbf{y} \in \mathbf{x}^0 + \mathcal{K}^k(\mathbf{A},\mathbf{r}^0)} \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_{\mathbf{A}},$$

kde $\|\mathbf{v}\|_{\mathbf{A}} := \sqrt{\mathbf{v}^T\,\mathbf{A}\,\mathbf{v}}$.

Důkaz:

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_{\mathbf{A}}^2 = \mathbf{x}^T\mathbf{A}\mathbf{x} + \underbrace{\mathbf{y}^T\mathbf{A}\mathbf{y} - 2\,\overbrace{\mathbf{x}^T\mathbf{A}}^{=\mathbf{b}^T}\,\mathbf{y}}_{=2f(\mathbf{y})}.$$

Stabilní a rychlé iterační metody

A-ortogonální báze

$$\mathcal{K}^k = \operatorname{span}\{\mathbf{d}^0 := \mathbf{r}^0, \mathbf{d}^1, \ldots, \mathbf{d}^k\},$$

kde $(\mathbf{d}^i)^T \mathbf{A}\, \mathbf{d}^j = 0$ pro $i \neq j$.

„Nezávislé" 1d minimalizace

$$\mathbf{x}^{k+1} = \mathbf{x}^0 + \sum_{i=1}^{k} \alpha^i \, \mathbf{d}^i,$$

kde

$$\alpha^i = \frac{(\mathbf{r}^0)^T \mathbf{d}^i}{(\mathbf{d}^i)^T \mathbf{A} \mathbf{d}^i} = \arg\min_{\alpha \geq 0} f^i(\alpha).$$

Důkaz:

$$f\left(\mathbf{x}^0 + \sum_{i=0}^{k} \alpha^i \mathbf{d}^i\right) = \underbrace{\frac{1}{2}(\mathbf{x}^0)^T \mathbf{A} \mathbf{x}^0 - \mathbf{b}^T \mathbf{x}^0}_{=f(\mathbf{x}^0)} + \sum_{i=0}^{k} \underbrace{\left[\frac{1}{2}(\alpha^i)^2 (\mathbf{d}^i)^T \mathbf{A} \mathbf{d}^i - \alpha^i (\mathbf{r}^0)^T \mathbf{d}^i\right]}_{=: f^i(\alpha^i)}.$$

Stabilní a rychlé iterační metody

$\mathbf{r}^{k+1} \perp \mathcal{K}^k$

Důkaz:

$$\mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - \mathbf{A}\,\mathbf{x}^{k+1} = -\nabla f(\mathbf{x}^{k+1}),$$

přičemž $\mathbf{x}^{k+1}$ je globální minimum f na $\mathbf{x}^0 + \mathcal{K}^k$.

3-členná rekurence Gramm-Schmidtova algoritmu

$$\mathbf{r}^{k+1} \perp \mathcal{K}^k = \operatorname{span}\{\mathbf{r}^0, \underbrace{\mathbf{A}\mathbf{r}^0, \ldots, \mathbf{A}^k\mathbf{r}^0}_{\mathbf{A}\mathcal{K}^{k-1}}\},$$

a tedy

$$\mathbf{r}^{k+1} \perp_{\mathbf{A}} \mathcal{K}^{k-1} = \operatorname{span}\{\mathbf{d}^0, \mathbf{d}^1, \ldots, \mathbf{d}^{k-1}\}.$$

Krok $k+1$ GS algoritmu se tedy redukuje na $\mathbf{A}$-ortogonalizaci vůči $\mathbf{d}^k$,

$$\mathbf{d}^{k+1} := \mathbf{r}^{k+1} - \beta^k \mathbf{d}^k, \quad \text{kde} \quad \beta^k := \frac{(\mathbf{r}^{k+1})^T \mathbf{A}\mathbf{d}^k}{(\mathbf{d}^k)^T \mathbf{A}\mathbf{d}^k}.$$

Stabilní a rychlé iterační metody

Algoritmus metody sdružených gradientů

$\mathbf{d}^0 := \mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^0$, $k := 0$

while $\rho^k := \|\mathbf{r}^k\|_?/\|\mathbf{r}^0\|_? > \varepsilon$ **do**

$\quad \mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \alpha^k \mathbf{d}^k$, kde $\alpha^k := \frac{(\mathbf{r}^k)^T \mathbf{d}^k}{(\mathbf{d}^k)^T \mathbf{A}\mathbf{d}^k}$

$\quad \mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{k+1}$

$\quad \mathbf{d}^{k+1} := \mathbf{r}^{k+1} - \beta^k \mathbf{d}^k$, kde $\beta^k := \frac{(\mathbf{r}^{k+1})^T \mathbf{A}\mathbf{d}^k}{(\mathbf{d}^k)^T \mathbf{A}\mathbf{d}^k}$

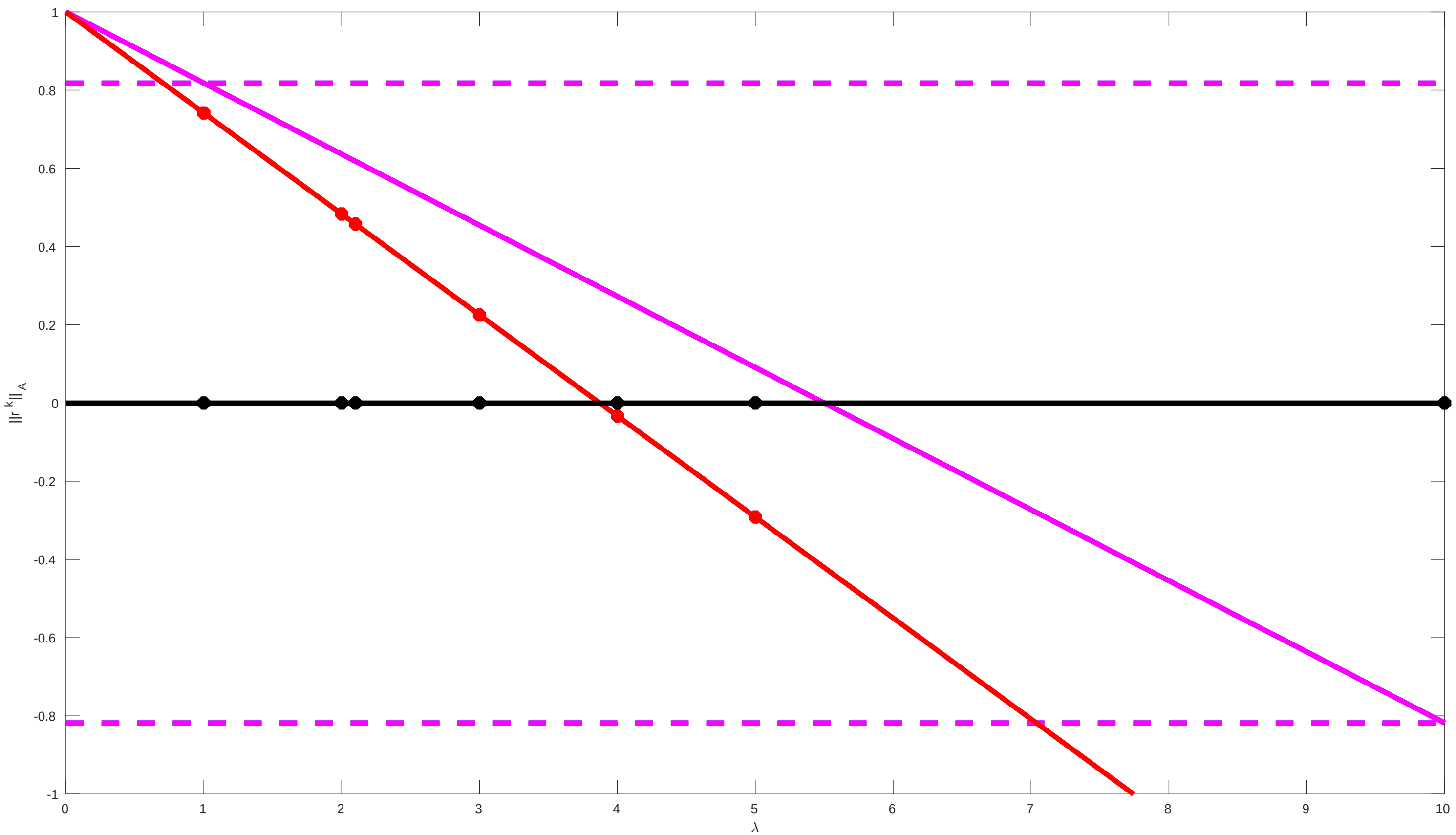
$\quad k := k + 1$

end while

Stabilní a rychlé iterační metody

Polynomy metod Richardsonovy, Čebyševovy a sdruž. gradientů: $k := 1$

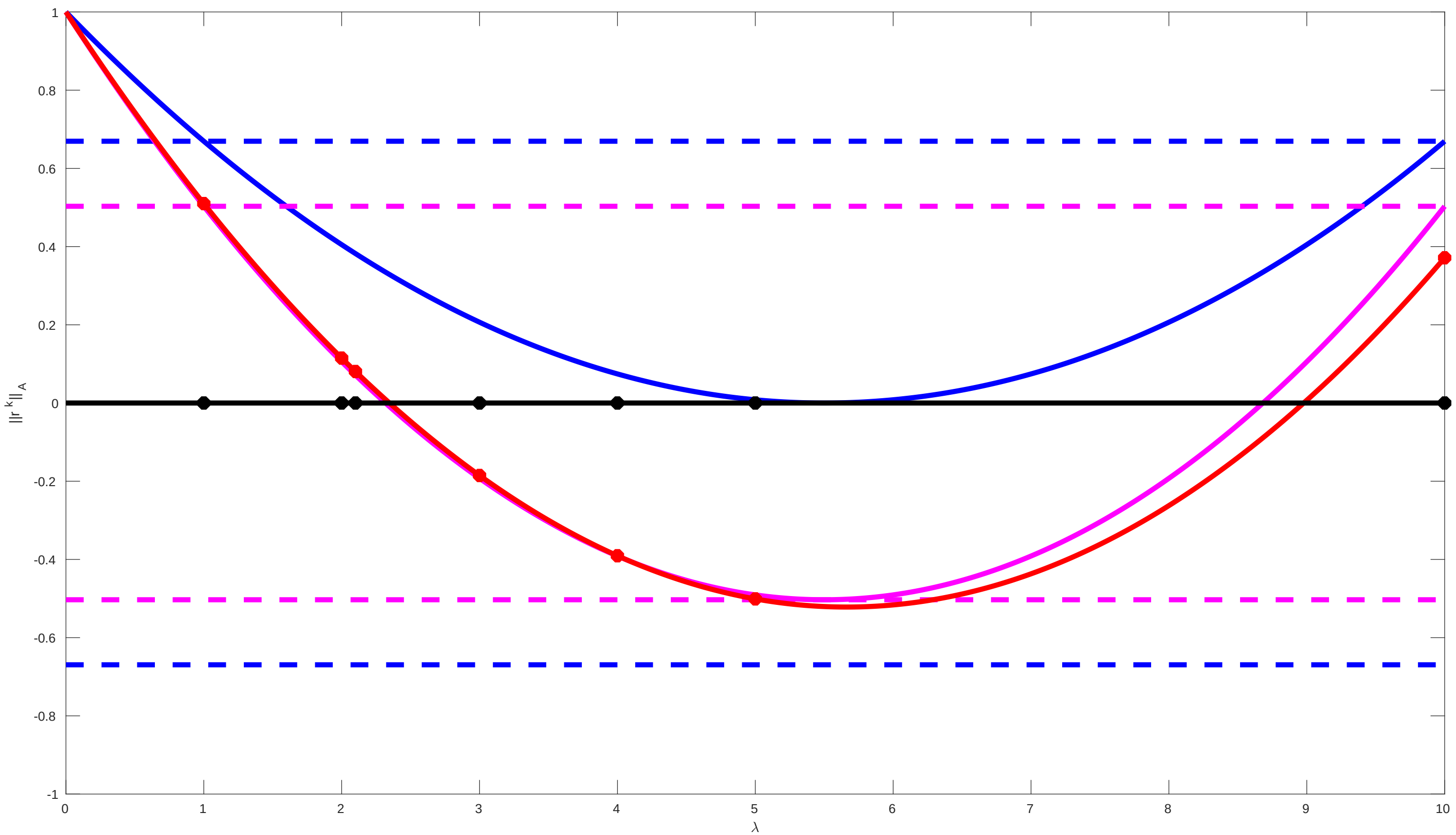
$\mathbf{A} := \mathrm{diag}(1, 2, 2.1, 3, 4, 5, 10)$, $\mathbf{r}^0 := \mathbf{1}$. $\rho^k_{\mathrm{Ceb}} = 0.249644$ vers. $\rho^k_{\mathrm{CG}} = 0.412299$



Stabilní a rychlé iterační metody

Polynomy metod Richardsonovy, Čebyševovy a sdruž. gradientů: $k := 2$

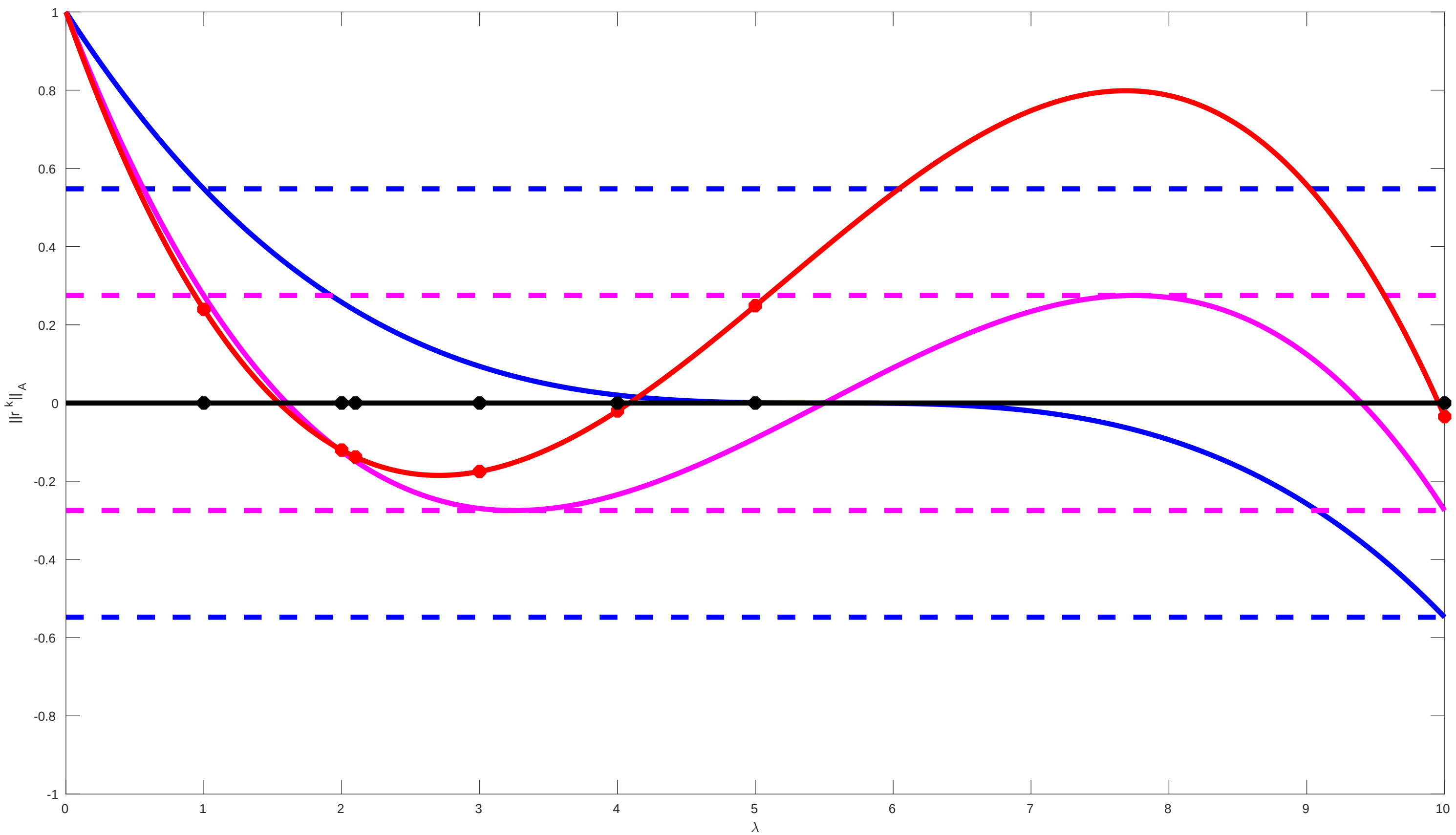
$\mathbf{A} := \mathrm{diag}(1, 2, 2.1, 3, 4, 5, 10)$, $\mathbf{r}^0 := \mathbf{1}$. $\quad \rho^k_{\mathrm{Ceb}} = 0.172525$ vers. $\rho^k_{\mathrm{CG}} = 0.151255$



Stabilní a rychlé iterační metody

Polynomy metod Richardsonovy, Čebyševovy a sdruž. gradientů: $k := 3$

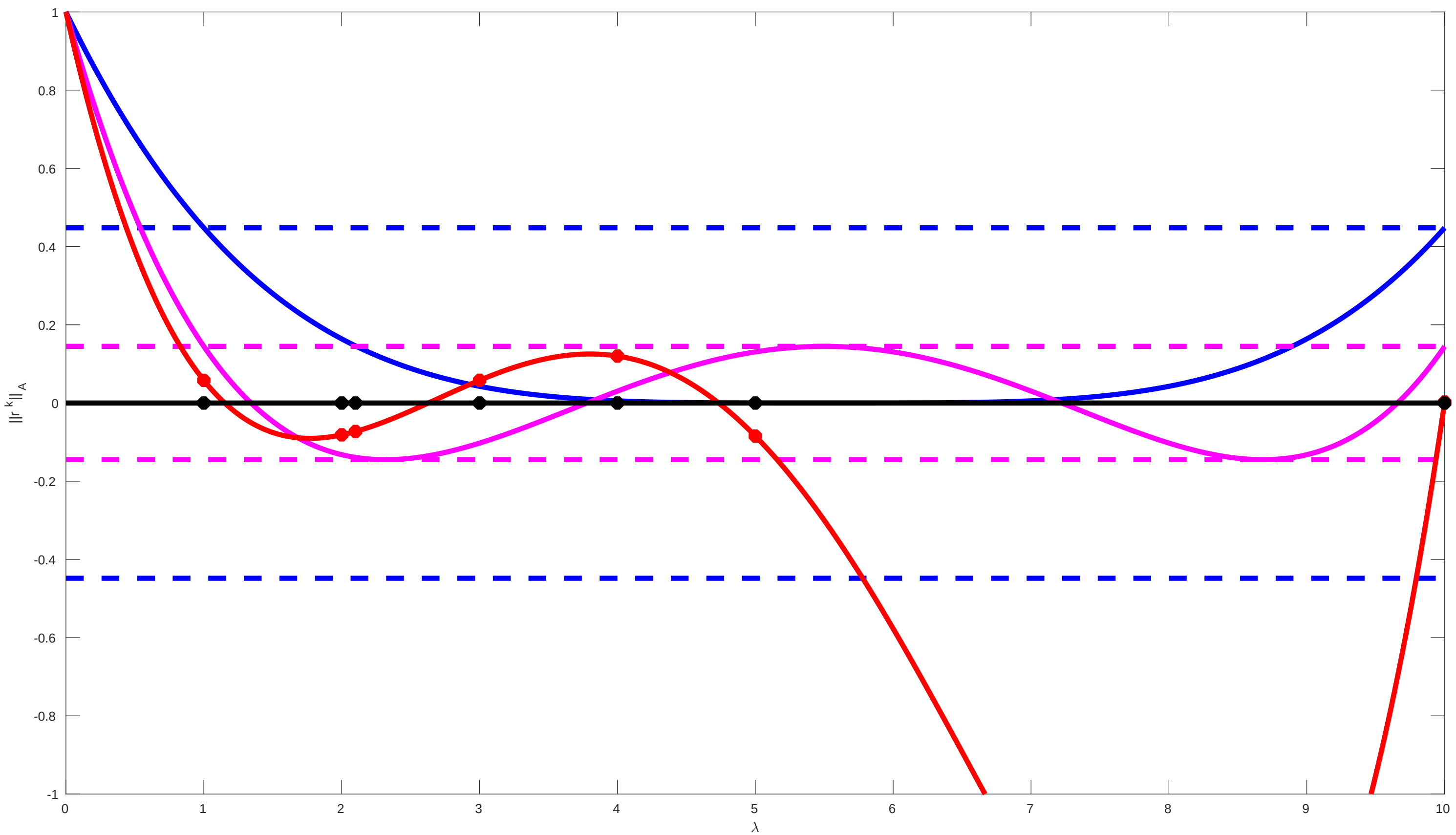
$\mathbf{A} := \mathrm{diag}(1, 2, 2.1, 3, 4, 5, 10)$, $\mathbf{r}^0 := \mathbf{1}$. $\rho^k_{\mathrm{Ceb}} = 0.0932961$ vers. $\rho^k_{\mathrm{CG}} = 0.0582925$



Stabilní a rychlé iterační metody

Polynomy metod Richardsonovy, Čebyševovy a sdruž. gradientů: $k := 4$

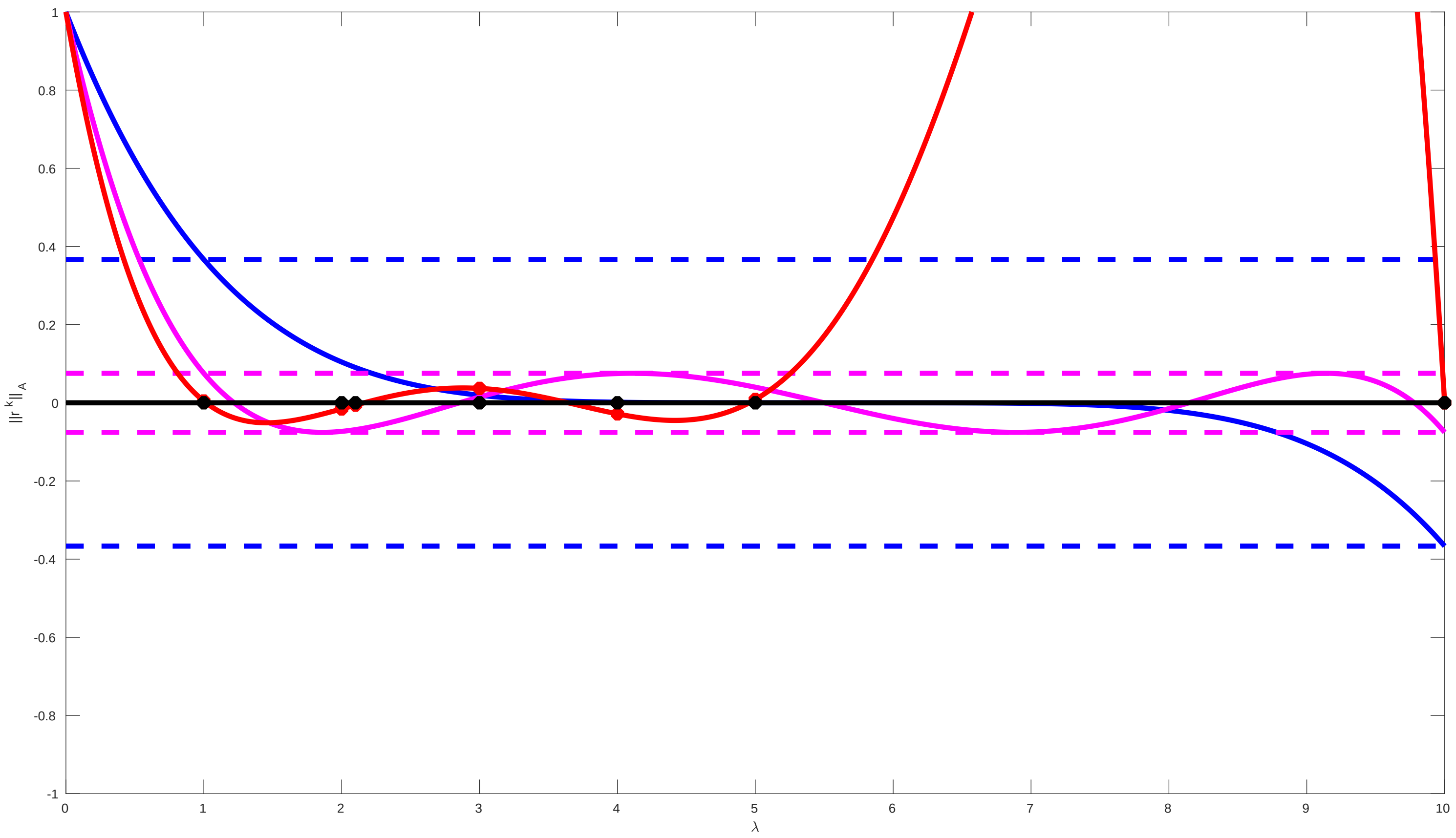
$\mathbf{A} := \mathrm{diag}(1, 2, 2.1, 3, 4, 5, 10)$, $\mathbf{r}^0 := \mathbf{1}$. $\quad \rho^k_{\mathrm{Ceb}} = 0.0517648$ vers. $\rho^k_{\mathrm{CG}} = 0.028698$



Stabilní a rychlé iterační metody

Polynomy metod Richardsonovy, Čebyševovy a sdruž. gradientů: $k := 5$

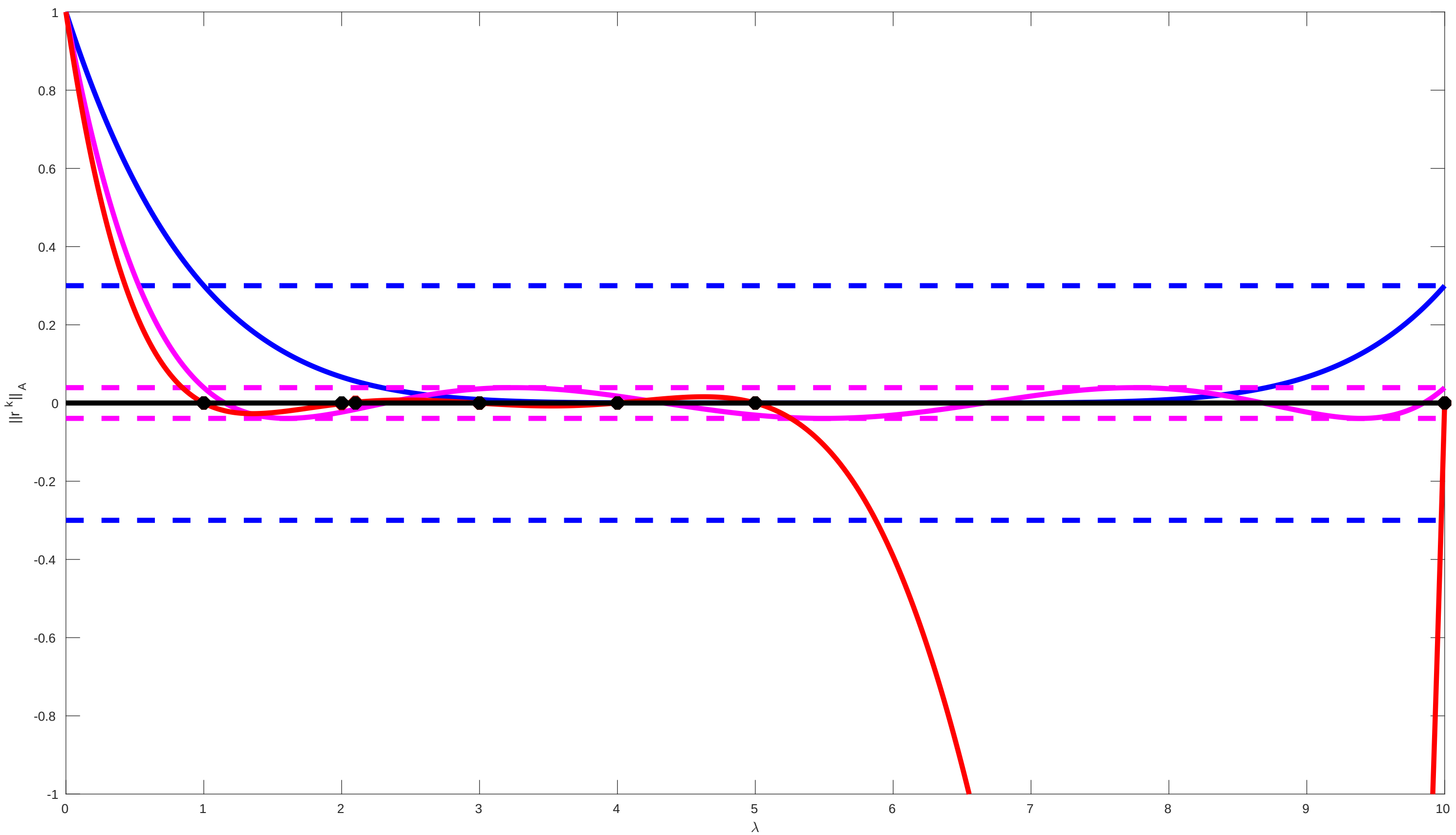
$\mathbf{A} := \mathrm{diag}(1, 2, 2.1, 3, 4, 5, 10)$, $\mathbf{r}^0 := \mathbf{1}$. $\rho^k_{\mathrm{Ceb}} = 0.0267991$ vers. $\rho^k_{\mathrm{CG}} = 0.00718051$



Stabilní a rychlé iterační metody

Polynomy metod Richardsonovy, Čebyševovy a sdruž. gradientů: $k := 6$

$\mathbf{A} := \mathrm{diag}(1, 2, 2.1, 3, 4, 5, 10)$, $\mathbf{r}^0 := \mathbf{1}$. $\rho^k_{\mathrm{Ceb}} = 0.0133936$ vers. $\rho^k_{\mathrm{CG}} = 0.000297212$



Stabilní a rychlé iterační metody

Polynomy metod Richardsonovy, Čebyševovy a sdruž. gradientů: $k := 7$

$\mathbf{A} := \mathrm{diag}(1, 2, 2.1, 3, 4, 5, 10)$, $\mathbf{r}^0 := \mathbf{1}$. $\rho^k_{\mathrm{Ceb}} = 0.00678998$ vers. $\rho^k_{\mathrm{CG}} = 3.35084e{-}15$