

Numerické metódy matematiky I

**Riešenie sústav lineárnych rovníc
(pokračovanie)**

OBSAH

1. Determinanty matíc a Cramerove pravidlo
2. Iteračné metódy riešenia sústavy rovníc
3. Konvergencia, iteračná matica, kritéria na ukončenie iterácií
4. Jacobiho metóda
5. Gauss-Seidlova metóda
6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
7. Predpodmienenie (preconditioning)
8. Literatúra

Determinanty druhého stupně

$$\mathbf{a_{11}x_1 + a_{12}x_2 = b_1}$$

$$\mathbf{a_{21}x_1 + a_{22}x_2 = b_2}$$

$$\mathbf{(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})x_1 = b_1a_{22} - b_2a_{12}}$$

$$\mathbf{(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})x_2 = a_{11}b_2 - a_{21}b_1}$$

$$x_1 = \frac{b_1a_{22} - b_2a_{12}}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}, \quad x_2 = \frac{a_{11}b_2 - a_{21}b_1}{a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}}.$$

Determinanty druhého stupňa

Definícia: Nech

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$$

je matica nad poľom F .

Potom výraz $a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$ nazývame
determinantom (druhého stupňa)

prislúchajúcim k matici A

a označujeme

$$a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix} = |A|.$$

$$x_1 = \frac{\begin{vmatrix} b_1 & a_{12} \\ b_2 & a_{22} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}} \quad x_2 = \frac{\begin{vmatrix} a_{11} & b_1 \\ a_{21} & b_2 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}}$$

Determinanty tretieho stupňa

$$\mathbf{a}_{11}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{12}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{13}\mathbf{x}_3 = \mathbf{b}_1$$

$$\mathbf{a}_{21}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{22}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{23}\mathbf{x}_3 = \mathbf{b}_2$$

$$\mathbf{a}_{31}\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_{32}\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_{33}\mathbf{x}_3 = \mathbf{b}_3$$

Násobme prvú rovnicu skalárom $\mathbf{a}_{22}\mathbf{a}_{33} - \mathbf{a}_{23}\mathbf{a}_{32}$,

druhú rovnicu skalárom $\mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{32} - \mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{33}$,

tretiu skalárom $\mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{23} - \mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{22}$,

potom prvé dve pričítajme k tretej a dostaneme:

$$\begin{aligned} & (\mathbf{a}_{11}\mathbf{a}_{22}\mathbf{a}_{33} - \mathbf{a}_{11}\mathbf{a}_{23}\mathbf{a}_{32} + \mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{21}\mathbf{a}_{32} \\ & - \mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{21}\mathbf{a}_{33} + \mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{23}\mathbf{a}_{31} - \mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{22}\mathbf{a}_{31}) \mathbf{x}_1 \\ & = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \mathbf{b}_1\mathbf{a}_{22}\mathbf{a}_{33} - \mathbf{b}_1\mathbf{a}_{23}\mathbf{a}_{32} + \mathbf{b}_2\mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{32} \\ & - \mathbf{b}_2\mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{33} + \mathbf{b}_3\mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{23} - \mathbf{b}_3\mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{22} \end{aligned}$$

Definícia: Nech A je štvorcová matica tretieho stupňa s prvkami z poľa F .

Potom **determinantom** (tretieho stupňa) prislúchajúcim k matici A nazývame výraz

$$\begin{aligned} & a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32} + a_{13}a_{21}a_{32} \\ & - a_{12}a_{21}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} - a_{13}a_{22}a_{31} = \\ & = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = |A|. \end{aligned}$$

Determinanty tretieho stupňa

Ak označíme

$$A_1 = \begin{pmatrix} b_1 & a_{12} & a_{13} \\ b_2 & a_{22} & a_{23} \\ b_3 & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad A_2 = \begin{pmatrix} a_{11} & b_1 & a_{13} \\ a_{21} & b_2 & a_{23} \\ a_{31} & b_3 & a_{33} \end{pmatrix}, \quad A_3 = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & b_3 \end{pmatrix},$$

potom

$$x_1 = \frac{|A_1|}{|A|}, \quad x_2 = \frac{|A_2|}{|A|}, \quad x_3 = \frac{|A_3|}{|A|}.$$

Cramerove pravidlo

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a_{11}} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & \mathbf{a_{22}} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & \mathbf{a_{33}} \end{vmatrix}$$

$$a_{11} \quad a_{12} \quad a_{13}$$

$$a_{21} \quad a_{22} \quad a_{23}$$

$$\mathbf{a_{11}a_{22}a_{33}} - \mathbf{a_{11}a_{23}a_{32}} + \mathbf{a_{13}a_{21}a_{32}} - \mathbf{a_{12}a_{21}a_{33}} + \mathbf{a_{12}a_{23}a_{31}} - \mathbf{a_{13}a_{22}a_{31}}$$

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a_{11}} & a_{12} & a_{13} \\ \mathbf{a_{21}} & \mathbf{a_{22}} & a_{23} \\ a_{31} & \mathbf{a_{32}} & \mathbf{a_{33}} \end{vmatrix}$$

$$\begin{matrix} a_{11} & a_{12} & \mathbf{a_{13}} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{matrix}$$

$$\mathbf{a_{11}a_{22}a_{33}} - \mathbf{a_{11}a_{23}a_{32}} + \mathbf{a_{13}a_{21}a_{32}} - \mathbf{a_{12}a_{21}a_{33}} + \mathbf{a_{12}a_{23}a_{31}} - \mathbf{a_{13}a_{22}a_{31}}$$

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} \mathbf{a}_{11} & \mathbf{a}_{12} & \mathbf{a}_{13} \\ \mathbf{a}_{21} & \mathbf{a}_{22} & \mathbf{a}_{23} \\ \mathbf{a}_{31} & \mathbf{a}_{32} & \mathbf{a}_{33} \end{vmatrix}$$

$$\mathbf{a}_{11} \quad \mathbf{a}_{12} \quad \mathbf{a}_{13}$$

$$\mathbf{a}_{21} \quad \mathbf{a}_{22} \quad \mathbf{a}_{23}$$

$$\mathbf{a}_{11}\mathbf{a}_{22}\mathbf{a}_{33} - \mathbf{a}_{11}\mathbf{a}_{23}\mathbf{a}_{32} + \mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{21}\mathbf{a}_{32} - \mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{21}\mathbf{a}_{33} + \mathbf{a}_{12}\mathbf{a}_{23}\mathbf{a}_{31} - \mathbf{a}_{13}\mathbf{a}_{22}\mathbf{a}_{31}$$

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

$$a_{11} \quad a_{12} \quad a_{13}$$

$$a_{21} \quad a_{22} \quad a_{23}$$

$$a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \mathbf{a_{13}} \\ a_{21} & \mathbf{a_{22}} & a_{23} \\ \mathbf{a_{31}} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

$$a_{11} \quad a_{12} \quad a_{13}$$

$$a_{21} \quad a_{22} \quad a_{23}$$

$$\mathbf{a_{11}a_{22}a_{33}} - \mathbf{a_{11}a_{23}a_{32}} + \mathbf{a_{13}a_{21}a_{32}} - \mathbf{a_{12}a_{21}a_{33}} + \mathbf{a_{12}a_{23}a_{31}} - \mathbf{a_{13}a_{22}a_{31}}$$

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

$$\begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{matrix}$$

$$a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

Sarrusove pravidlo

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}$$

$$\begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \end{matrix}$$

$$a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32} + a_{13}a_{21}a_{32} - a_{12}a_{21}a_{33} + a_{12}a_{23}a_{31} - a_{13}a_{22}a_{31}$$

Determinant štvorcovej matice

Ak $\mathbf{A} = [a_{ij}]$ je štvorcová matica typu $n \times n$,
tak jej **determinant** je isté presne definované číslo,
ktoré označujeme symbolom $|\mathbf{A}|$.

Uvedený vzťah nazývame aj
rozvojom determinantu podľa i -teho riadku.

Determinant štvorcovej matice

Pokiaľ sme urobili **LU** rozklad matice **A**,
potom platí

$$|\mathbf{A}| = |\mathbf{L}| \cdot |\mathbf{U}|$$

pričom

$$|\mathbf{L}| = l_{11}l_{22}l_{33}\dots l_{nn} \quad |\mathbf{U}| = u_{11}u_{22}u_{33}\dots u_{nn}$$

Počet aritmetických operácií LU rozkladu je rádovo **n^3** .

To je pri výpočte determinantov vyšších rádov

oveľa menej než **$n!$** operácií,

ktoré by sme museli realizovať

pri výpočte determinantu rozvojom.

OBSAH

1. Determinanty matíc a Cramerove pravidlo
2. **Iteračné metódy riešenia sústavy rovníc**
3. Konvergencia, iteračná matica, kritéria na ukončenie iterácií
4. Jacobiho metóda
5. Gauss-Seidlova metóda
6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
7. Predpodmienenie (preconditioning)
8. Literatúra

Mnoho praktických problémov
vyžaduje riešenie
rozsiahlych sústav lineárnych rovníc

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

v ktorých je matica sústavy $\mathbf{A}$ riedka,
t.j. má relatívne málo nenulových prvkov.

Štandardné eliminačné metódy
nie sú vhodné
na riešenie veľkých riedkych lineárnych rovníc.

(*Prečo ?*)

Pretože v priebehu eliminácie postupne dochádza
k zaplňovaniu
pôvodne nenulových pozícií v matici sústavy –
- matica prestáva byť riedkou.

Iteračné metódy

Zvolí sa počiatočný vektor $\mathbf{X}_0$ a generuje sa postupnosť vektorov

$$\mathbf{X}_0 \rightarrow \mathbf{X}_1 \rightarrow \mathbf{X}_2 \cdots,$$

ktorá konverguje k hľadanému riešeniu $\mathbf{X}$.

Spoločnou črtou všetkých iteračných metód je fakt, že každý iteračný krok

$$\mathbf{X}_k \rightarrow \mathbf{X}_{k+1}$$

vyžaduje objem výpočtov,

ktorý je porovnateľný

s násobením matice $\mathbf{A}$ vektorom,

čo je pre riedke matice pomerne malý počet operácií.

*Príklad: Majme maticu sústavy $\mathbf{A}$ rádu n .
Aký počet operácií násobenia a sčítania vykonáme
pri násobení jedného riadku matice $\mathbf{A}$
ak tento riadok obsahuje m nenulových prvkov?*

($m \cdot n$)

Štvorcová matica typu $n \times n$
sa nazýva **regulárna**
ak má hodnotu n ;
ináč sa nazýva **singulárna**

Determinant regulárnej matice je nenulový

OBSAH

1. Determinanty matíc a Cramerove pravidlo
2. Iteračné metódy riešenia sústavy rovníc
3. Konvergencia, iteračná matica, kritéria na ukončenie iterácií
4. Jacobiho metóda
5. Gauss-Seidlova metóda
6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
7. Predpodmienenie (preconditioning)
8. Literatúra

Konvergenca

Väčšina klasických iteračných metód vychádza z rozkladu matice sústavy $\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N}$, kde $\mathbf{M}$ je regulárna matica.

Potom je postupnosť $\mathbf{x}_k$ definovaná

$$\mathbf{M}\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{N}\mathbf{x}_k + \mathbf{b},$$

pričom počiatočná aproximácia $\mathbf{x}_0$ je daná.

Hovoríme, že **iteračná metóda konverguje**,

a píšeme $\mathbf{x}_k \rightarrow \mathbf{x}$,
keď číselná postupnosť

$$\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}\| \rightarrow 0.$$

Označme $\mathbf{e}_k = \mathbf{x}_k - \mathbf{x}$ chybu v k -tej iterácii.

Pretože $\mathbf{M}\mathbf{x} = \mathbf{N}\mathbf{x} + \mathbf{b}$, dostaneme

$$\mathbf{M}(\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}) = \mathbf{N}(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}) \quad \text{alebo} \quad \mathbf{e}_{k+1} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{e}_k \quad .$$

Ak označíme $\mathbf{T} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ potom dostaneme

$$\|\mathbf{e}_{k+1}\| \leq \|\mathbf{T}\| \cdot \|\mathbf{e}_k\| \leq \|\mathbf{T}\|^2 \cdot \|\mathbf{e}_{k-1}\| \leq \dots \leq \|\mathbf{T}\|^{k+1} \cdot \|\mathbf{e}_0\| .$$

Konvergenca iteračnej metódy
z ľubovoľného štartovacieho vektoru
preto isto nastane, ak

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

kde $\mathbf{T} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}$ je **iteračná matica**.

$\|\mathbf{T}\|$ je ľubovoľná maticová norma

$$\|\mathbf{T}\| = \sqrt{\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n t_{ij}^2}$$

Frobeniova norma

$$\|\mathbf{T}\| = \max_i \sum_{j=1}^n |t_{ij}|$$

maximálne súčty v stĺpcoch

$$\|\mathbf{T}\| = \max_j \sum_{i=1}^n |t_{ij}|$$

maximálne súčty v riadkoch

Ako rozhodnúť,
či $\mathbf{x}_{k+1}$ je už dostatočne dobrá aproximácia
riešenia $\mathbf{x}$?

Najčastejšie sa testuje jedna z podmienok:

1.
$$\|\mathbf{x}_{k+1} - \mathbf{x}_k\| \leq \varepsilon \|\mathbf{x}_k\|$$

OBSAH

1. Determinanty matíc a Cramerove pravidlo
2. Iteračné metódy riešenia sústavy rovníc
3. Konvergencia, iteračná matica, kritéria na ukončenie iterácií
4. Jacobiho metóda
5. Gauss-Seidlova metóda
6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
7. Predpodmienenie (preconditioning)
8. Literatúra

Jacobiho metóda

Predpokladajme, že $\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$,
kde $\mathbf{D}$ je diagonálna matica,
ktorá má rovnakú diagonálu ako $\mathbf{A}$,
a kde $\mathbf{L}$ resp. $\mathbf{U}$ je rýdzo dolná resp. horná
trojuholníková časť matice $\mathbf{A}$, t.j.

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & a_{22} & & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ a_{21} & 0 & & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & & 0 & a_{n-1,n} \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 \end{pmatrix}.$$

Jacobiho metóda

Jacobiho metódu definujeme
na základe rozkladu

$$\mathbf{A} = \mathbf{M} - \mathbf{N},$$

kde $\mathbf{M} = \mathbf{D}$ a $\mathbf{N} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})$

a zapisujeme ju v tvare

$$\mathbf{D}\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{b} - (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}_k$$

Sústava s diagonálnou maticou sa rieši ľahko.

Ak ju zapíšeme po zložkách dostaneme

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n .$$

Analýzou vlastností
iteračnej matice $\mathbf{T} = -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U})$ je možné ukázať, že
Jacobiho metóda konverguje,
keď $\mathbf{A}$ je rýdzo diagonálne dominantná.

Definícia: Hovoríme, že matica $\mathbf{A} = \{a_{ij}\}_{i,j=1}^n$ je

rýdzo diagonálne dominantná, ak

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

Inými slovami, v každom riadku je absolútna hodnota diagonálneho prvku väčšia ako súčet absolútnych hodnôt ostatných prvkov tohto riadku.

OBSAH

1. Determinanty matíc a Cramerove pravidlo
2. Iteračné metódy riešenia sústavy rovníc
3. Konvergencia, iteračná matica, kritéria na ukončenie iterácií
4. Jacobiho metóda
5. Gauss-Seidlova metóda
6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
7. Predpodmienenie (preconditioning)
8. Literatúra

Gauss-Seidlova metóda

Pripomeňme si Jacobiho metódu

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n .$$

Ak namiesto hodnôt $x_i^{(k)}$ využijeme

už spočítané hodnoty $x_i^{(k+1)}$ dostaneme

Gauss-Seidlovu metódu

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n .$$

Gauss-Seidlova metóda

V maticovom tvare

$$(\mathbf{D} + \mathbf{L})\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{b} - \mathbf{U}\mathbf{x}_k$$

Definícia: Matica $\mathbf{A}$ je **pozitívne definitná**, ak
pre ľubovoľný nenulový vektor $\mathbf{x}$ platí

$$\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} > 0$$

Analýzou vlastností
iteračnej matice $\mathbf{T} = -(\mathbf{D} + \mathbf{L})^{-1}\mathbf{U}$ je možné ukázať, že
Gauss-Seidlova metóda konverguje,
keď $\mathbf{A}$ je rýdzo diagonálne dominantná
alebo
pozitívne definitná.

Gauss-Seidlova metóda

Overenie toho, či je matica pozitívne definitná je často problematické.

Ak vynásobíme ľubovoľnú regulárnu štvorcovú maticu $\mathbf{A}$ zľava maticou k nej transponovanou, vzniknutá matica

$$\mathbf{A}^T \mathbf{A}$$

je symetrická a pozitívne definitná.

Preto je zaručené, že pri riešení sústavy

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

Gauss-Seidlova metóda konverguje.

V takomto prípade však môže konvergovať veľmi pomaly.

- Konvergencia Gauss-Seidlovej metódy je pre mnohé matice **A** rýchlejšia než konvergencia Jacobiho metódy
- Existujú matice, pre ktoré Gauss-Seidlova metóda konverguje a Jacobiho nie a naopak
- Jacobiho metóda umožňuje paralelný výpočet, zatiaľ čo Gauss-Seidlova metóda je zo svojej podstaty sekvenčná

Zhrnutie

- Gaussova eliminačná metóda a Cramerove pravidlo vedú priamo k riešeniu.
(Keby sme sa nedopúšťali zaokrúhľovacích chýb, našli by sme presné riešenie.)
- Základom GEM je úprava matice na trojuholníkový tvar. Ten dostaneme pomocou pričítania vhodných násobkov vybraných riadkov matice k ostatným riadkom.
- Vplyv zaokrúhľovacích chýb pri GEM môže byť značný, preto sa používa GEM s výberom hlavného prvku.
- GEM je náročná z časového aj pamäťového hľadiska. Najlepšie sa hodí pre nie príliš rozsiahle sústavy s plnou maticou.
- Pri Cramerovom pravidle jednotlivé neznáme počítame ako podiely determinantov.
Je vhodné len pre veľmi malé sústavy rovníc.

Zhrnutie

- Pomocou iteračných metód obvykle nájdeme len približné riešenie sústavy.
- Na začiatku zvolíme počiatočnú aproximáciu riešenia a tú potom opakovaným dosadzovaním do iteračných vzťahov spresňujeme. S výpočtom skončíme obvykle vtedy, keď je norma rozdielu po sebe idúcich iterácií dostatočne malá.
- Iteračné metódy môžu divergovať. To závisí na vlastnosti matice sústavy.
- Iteračné metódy sú vhodné na riešenie veľkých sústav s riedkou maticou sústavy. Pre malý počet rovníc je vhodnejšia GEM.

OBSAH

1. Determinanty matíc
2. Iteračné metódy riešenia sústavy rovníc
3. Konvergencia, iteračná matica, kritéria na ukončenie iterácií
4. Jacobiho metóda
5. Gauss-Seidlova metóda

OBSAH

6. Gradienté iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
 - Metóda najväčšieho spádu
 - Metóda združených (konjugovaných) gradientov (CG)
 - Zovšeobecnenia metódy CG
 - Konvergencia metódy CG
 - Predpodmienenie (preconditioning)
 - Zhrnutie
7. Literatúra

Gradientné iteračné metódy

Gradientné iteračné metódy sú zvlášť atraktívne
pre riedke systémy lineárnych rovníc,
pretože často využívajú
len násobenie matice sústavy vektorom.

Základné metódy tejto skupiny sú vhodné
na riešenie sústavy
so **symetrickou** a **pozitívne definitnou** maticou
a využívajú fakt,
že riešenie takejto sústavy je
jediným minimom formy

$$Q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{x}^T \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^T \mathbf{b} .$$

Definícia: Matica **A** je **pozitívne definitná**, ak
pre ľubovoľný nenulový vektor $\mathbf{x}$ platí

$$\mathbf{x}^T \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{x} > 0$$

Gradientné iteračné metódy

Postupnosť vektorov,
ktorá konverguje k presnému riešeniu danej sústavy
sa dá potom konštruovať tak,
že za predpokladu,
že k -tá aproximácia $\mathbf{x}^{(k)}$ je už určená,
sa zvolí smer $\mathbf{v}^{(k)}$ a určí číslo α_k tak,
aby vektor $\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)}$
minimalizoval formu Q na priamke $\mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)}$
a položí sa
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)} .$$

Špeciálnou voľbou smerov $\mathbf{v}^{(k)}$
v jednotlivých krokoch
dostávame konkrétne metódy.

Gradientné iteračné metódy

Ak za smery $\mathbf{v}^{(1)}, \mathbf{v}^{(2)}, \dots$ volíme postupne vektory
v smere prvej, druhej, ... súradnice,
dostaneme Gauss-Seidlovu metódu.

Jednu iteráciu (v zmysle Gauss-Seidlovej metódy)
dostaneme až po vyčerpaní všetkých súradníc.

Gauss-Seidlova metóda

Pripomeňme si Gauss-Seidlovu metódu

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right), \quad i = 1, 2, \dots, n .$$

**Gauss-Seidlova metóda konverguje,
keď A je rýdzo diagonálne dominantná
alebo
pozitívne definitná.**

OBSAH

6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
 - Metóda najväčšieho spádu
 - Metóda združených (konjugovaných) gradientov (CG)
 - Zovšeobecnenia metódy CG
 - Konvergencia metódy CG
 - Predpodmienenie (preconditioning)
 - Zhrnutie
7. Literatúra

Metóda najväčšieho spádu

V tejto metóde sa volí smer $\mathbf{v}^{(k)}$ tak,
aby súhlasil so smerom gradientu funkcie Q .

Príslušné vzorce sú

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \frac{\mathbf{r}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{r}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{r}^{(k)}} \mathbf{r}^{(k)},$$

kde vektor $\mathbf{r}^{(k)}$ sa nazýva
rezíduum k -tej aproximácie
a je daný vzťahom

$$\mathbf{r}^{(k)} = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}^{(k)}.$$

OBSAH

6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
 - Metóda najväčšieho spádu
 - Metóda združených (konjugovaných) gradientov (CG)
 - Zovšeobecnenia metódy CG
 - Konvergencia metódy CG
 - Predpodmienenie (preconditioning)
 - Zhrnutie
7. Literatúra

V tejto metóde sa volia vektory $\mathbf{v}^{(k)}$ tak,
že vzniknú **A**-ortogonalizáciou vektora rezíduí.

A-ortogonalizácia

(pri danej symetrickej a pozitívne definitnej matici **A**)
je postup,
pomocou ktorého

sa z postupnosti lineárne nezávislých vektorov $\mathbf{u}^{(1)}, \dots, \mathbf{u}^{(n)}$
zostrojí iná postupnosť lineárne nezávislých vektorov $\mathbf{v}^{(1)}, \dots, \mathbf{v}^{(n)}$ tak,
že platí

$$\mathbf{v}^{(i)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(j)} = 0$$

pre $i \neq j$.

To vedie na algoritmus popísaný rovnicami:

$$\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{r}^{(1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} ,$$

To vedie na algoritmus popísaný rovnicami:

$$\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{r}^{(1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} ,$$

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}} ,$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)} ,$$

To vedie na algoritmus popísaný rovnicami:

$$\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{r}^{(1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} ,$$

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}} ,$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)} ,$$

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)} ,$$

To vedie na algoritmus popísaný rovnicami:

$$\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{r}^{(1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} ,$$

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}} ,$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)} ,$$

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)} ,$$

$$\beta_k = -\frac{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{r}^{(k+1)}}{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}} ,$$

$$\mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k+1)} + \beta_k \mathbf{v}^{(k)} .$$

Z podstaty algoritmu vyplýva,
že po n iteráciách
dostaneme presné riešenie systému rovníc
a teda **nejde** v pravom zmysle slova
o iteračnú metódu.

To by však platilo len v prípade,
že by sme sa nedopúšťali zokrúhľovacích chýb.

Preto je nutné pozeráť sa na MCG ako na iteračnú metódu
a definovať kritériá na zastavenie iterácií.

OBSAH

6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
 - Metóda najväčšieho spádu
 - Metóda združených (konjugovaných) gradientov (CG)
 - Zovšeobecnenia metódy CG
 - Konvergencia metódy CG
 - Predpodmienenie (preconditioning)
 - Zhrnutie
7. Literatúra

V prípade nesymetrických
a nie nutne pozitívne definitných matíc
používame
metódu bikonjugovaných gradientov
(napr. subroutina **linbcg** z *Numerical Recipes*).

Obyčajná metóda konjugovaných gradientov je
jej špeciálnym prípadom.

Iný variant pre symetrické, ale nie pozitívne definitné matice **A** dostaneme ak v obyčajnej metóde CG zameníme všetky maticové násobenia

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \text{ za } \mathbf{a} \cdot \mathbf{A} \cdot \mathbf{b} .$$

Táto metóda sa nazýva **algorithmus minimálnych rezíduí**, pretože zodpovedá postupným minimalizáciám funkcie

$$Q(\mathbf{x}) = \frac{1}{2} \mathbf{r}^T \cdot \mathbf{r} = \frac{1}{2} |\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} - \mathbf{b}|^2 .$$

Zovšeobecnenie tohto algoritmu pre nesymetrické matice vedie na metódu **zovšeobecnených minimálnych rezíduí (GMRES)**.

OBSAH

6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
 - Metóda najväčšieho spádu
 - Metóda združených (konjugovaných) gradientov (CG)
 - Zovšeobecnenia metódy CG
 - Konvergencia metódy CG
 - Predpodmienenie (preconditioning)
 - Zhrnutie
7. Literatúra

Nech $\mathbf{x}^{(k)}$ je približné riešenie v k -tom kroku CG
a nech $\mathbf{x}^*$ je presné riešenie.

Pre symetrickú, pozitívne definitnú maticu definujeme
číslo podmienenosti matice $\kappa(\mathbf{A})$
a **$\mathbf{A}$ -normu** ľubovoľného vektora $\mathbf{z}$:

$$\kappa(\mathbf{A}) := \frac{\lambda_{\max}(\mathbf{A})}{\lambda_{\min}(\mathbf{A})}, \quad \|\mathbf{z}\|_{\mathbf{A}} := (\mathbf{A}\mathbf{z}, \mathbf{z})^{1/2}.$$

Potom

$$\|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(k)}\|_{\mathbf{A}} \leq 2 \left[\frac{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} - 1}{\sqrt{\kappa(\mathbf{A})} + 1} \right]^k \|\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(1)}\|_{\mathbf{A}}$$

Pri $\kappa(\mathbf{A}) \gg 1$ je konvergenca **veľmi pomalá**.

OBSAH

6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
 - Metóda najväčšieho spádu
 - Metóda združených (konjugovaných) gradientov (CG)
 - Zovšeobecnenia metódy CG
 - Konvergencia metódy CG
 - Predpodmienenie (preconditioning)
 - Zhrnutie
7. Literatúra

Účelom predpodmienenia je
zvýšiť rýchlosť konvergenzie iteračnej metódy tak,
že sa rieši náhradný systém lineárnych rovníc,
v ktorom má nová matica sústavy
nižšie číslo podmienenosti κ
než pôvodná matica.

Nech $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{b}$ je pôvodný lineárny systém.

Ľavé predpodmienenie definujeme nasledovne:

Nech matica $\mathbf{M}$ je regulárna a „blízka“ k matici $\mathbf{A}$.

Potom riešime sústavu

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}$$

Pravé predpodmienenie definujeme nasledovne:

Nech matica $\mathbf{M}$ je regulárna. Potom riešime sústavu

$$\mathbf{A}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{u} = \mathbf{b}, \quad \mathbf{x} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{u} .$$

Predpodmienenie v metóde CG

Pôvodný algoritmus CG:

$$\mathbf{r}^{(1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)}$$

$$\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{r}^{(1)}$$

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}}$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)}$$

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}$$

$$\beta_k = -\frac{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{r}^{(k+1)}}{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}}$$

$$\mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k+1)} + \beta_k \mathbf{v}^{(k)}$$

Algoritmus predpodmienenenej CG:

$$\mathbf{r}^{(1)} = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}^{(1)} \quad , \quad \mathbf{z}^{(1)} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}^{(1)}$$

$$\mathbf{v}^{(1)} = \mathbf{z}^{(1)}$$

$$\alpha_k = \frac{\mathbf{z}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}}{\mathbf{v}^{(k)T} \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)}}$$

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{x}^{(k)} + \alpha_k \mathbf{v}^{(k)}$$

$$\mathbf{r}^{(k+1)} = \mathbf{r}^{(k)} - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{v}^{(k)} \quad , \quad \mathbf{z}^{(k+1)} = \mathbf{M}^{-1} \mathbf{r}^{(k+1)}$$

$$\beta_k = \frac{\mathbf{z}^{(k+1)T} \mathbf{r}^{(k+1)}}{\mathbf{z}^{(k)T} \mathbf{r}^{(k)}}$$

$$\mathbf{v}^{(k+1)} = \mathbf{z}^{(k+1)} + \beta_k \mathbf{v}^{(k)}$$

Jacobiho predpodmieňovač (preconditionner)

Najjednoduchším predpodmieňovačom je diagonálna matica, ktorá je tvorená len diagonálnymi členmi matice **A**

$$M_{ij} = \begin{cases} A_{ii} & \text{ak } i = j \\ 0 & \text{ak } i \neq j \end{cases}$$

Potom

$$M_{ij}^{-1} = \frac{\delta_{ij}}{A_{ii}} .$$

Takéto predpodmienenie sa nazýva
Jacobiho predpodmienenie
alebo
diagonálne škálovanie.

Výhody Jacobiho predpodmienenia sú
v ľahkej implementácii a
nízkych pamäťových nárokoch.

Viac sofistikované voľby predpodmieňovača
musia byť kompromisom
medzi redukciou čísla podmienenosti matice
a tým rýchlejšou konvergenciou
a
časom potrebným na vypočítanie inverznej matice $\mathbf{M}^{-1}$.

Viac informácií je možné nájsť v prehľade

M. Benzi (2002):

Preconditioning Techniques for Large Linear Systems: A Survey

Journal of Computational Physics **182**, 418-477

[doi: 10.1006/jcph.2002.7176](https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7176)

Príklad

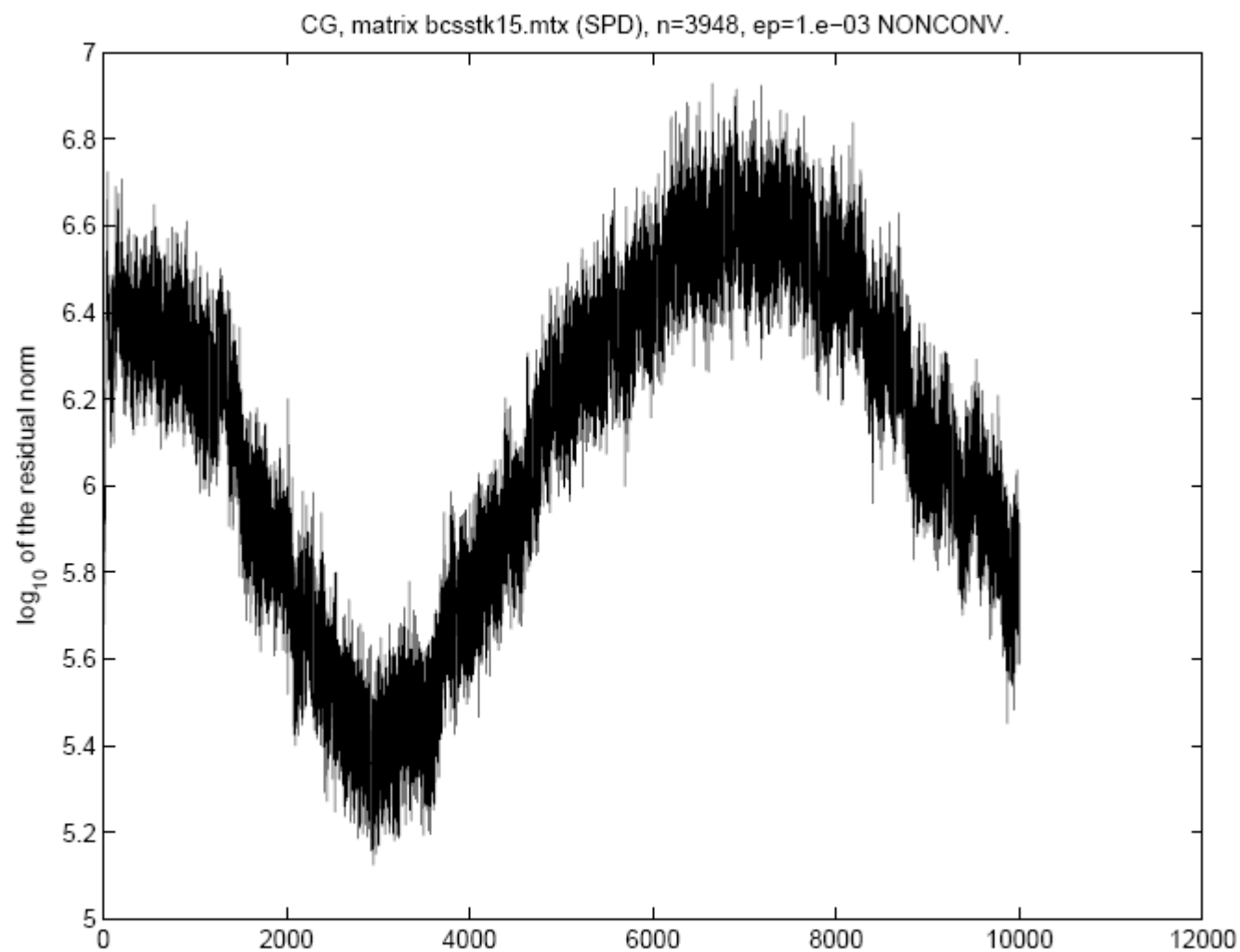


Figure: CG, $\kappa(A) = 8 * 10^9$

Príklad

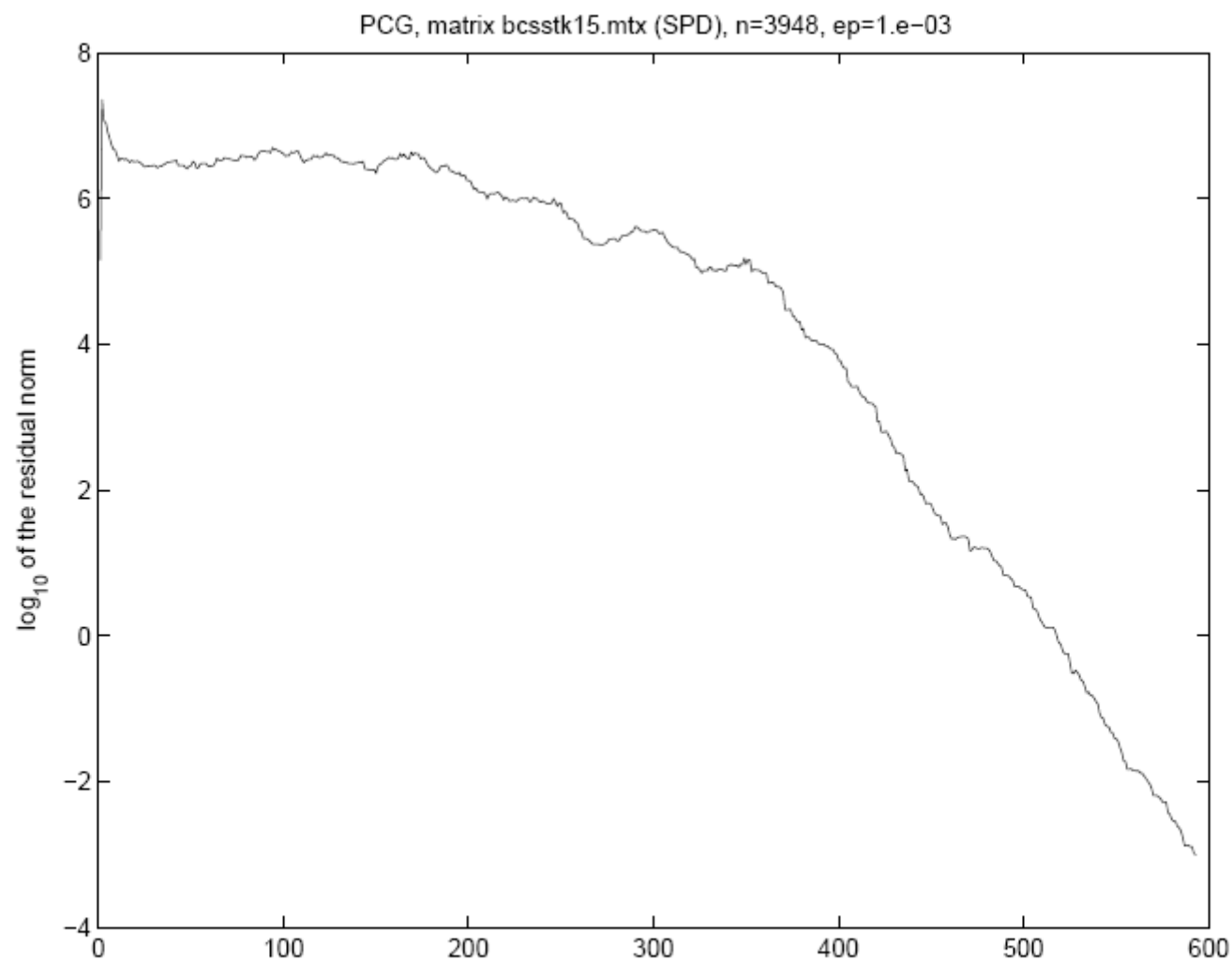


Figure: PCG, $\kappa(A) = 8 * 10^9$,

OBSAH

6. Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
 - Metóda najväčšieho spádu
 - Metóda združených (konjugovaných) gradientov (CG)
 - Zovšeobecnenia metódy CG
 - Konvergencia metódy CG
 - Predpodmienenie (preconditioning)
 - Zhrnutie
7. Literatúra

- Gradientné iteračné metódy riešenia systému lineárnych rovníc
- Metóda najväčšieho spádu
- Metóda konjugovaných gradientov.
Smerové vektory vzniknú $\mathbf{A}$ -ortogonalizáciou vektora rezíduí.
- Zovšeobecnenia metódy CG
 - metóda bikonjugovaných gradientov
 - metóda GMRES
- Konvergencia metódy CG – závislosť na čísle podmienenosti matice
- Predpodmienenie CG
 - Jacobiho predpodmienenie

Literatúra

-  I.S. Berezin, N.P. Židkov: *Číslennýje metody I,II*, Nauka, Moskva, 1962.
-  G.Dahlquist, G. Å Björk: *Numerical Methods*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1974.
-  M.Fiedler: *Speciální matice a jejich použití v numerické matematice*, SNTL, Praha, 1981.
-  D.Hanselman, B.Littlefield: *Mastering MATLAB 7*, Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, NJ, 2005.
-  G.Hämmerlin, K. H. Hoffmann: *Numerical Mathematics*, Springer-Verlag, Berlin, 1991.
-  M. T. Heath: *Scientific Computing. An Introductory Survey*, McGraw-Hill, New York, 2002.
-  I.Horová, J. Zelinka: *Numerické metody*, učební text Masarykovy univerzity, Brno, 2004.
-  J.Kobza: *Splajny*, učební text Palackého univerzity, Olomouc, 1993.
-  J.Klapka, J.Dvořák, P.Popela: *Metody operačního výzkumu*, učební text, FSI VUT Brno, 2001.

Literatúra

-  J. H. Mathews, K. D. Fink: *Numerical Methods Using MATLAB*, Pearson Prentice Hall, New Jersey, 2004.
-  MATLAB: *Mathematics*, Version 7, The MathWorks, Inc., Natick, 2004.
-  G. Meurant: *Computer Solution of Large Linear Systems*, Elsevier, Amsterdam, 1999.
-  S. Míka: *Numerické metody algebry*, SNTL, Praha, 1985..
-  C. B. Moler: *Numerical Computing with MATLAB*, Siam, Philadelphia, 2004.
<http://www.mathworks.com/moler>.
-  J. Nocedal, S. J. Wright: *Numerical Optimization, Springer Series in Operations Research*, Springer, Berlin, 1999.
-  A. Quarteroni, R. Sacco, F. Saleri: *Numerical Mathematics*, Springer, Berlin, 2000.
-  W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling: *Numerical Recipes in Pascal, The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, Cambridge, 1990.

-  P. Přikryl: *Numerické metody matematické analýzy*, SNTL, Praha, 1985.
-  A. R. Ralston: *Základy numerické matematiky*, Academia, Praha, 1973.
-  K. Rektorys: *Přehled užití matematiky I,II*, Prometheus, Praha, 1995.
-  J. Stoer, R. Bulirsch: *Introduction to Numerical Analysis*, Springer-Verlag, New York, 1993.
-  E. Vitásek: *Numerické metody*, SNTL, Praha, 1987.
-  W. Y. Yang, W. Cao, T. S. Chung, J. Morris: *Applied Numerical Methods Using Matlab*, John Willey & Sons, New Jersey, 2005.