

Numerická matematika

Jiří Felcman

Univerzita Karlova v Praze



Matematicko-fyzikální fakulta



KNM PRESS • PRAHA

2021

PŘEDMLUVA

1. přednáška

1. felcman@karlin.mff.cuni.cz
 - Tel. 95155 3392
 - KNM č. dv. K462
 - <http://www.karlin.mff.cuni.cz/~felcman/nm.pdf>
 - <http://www.karlin.mff.cuni.cz/~felcman/Rem-CG.pdf>
 - http://www.karlin.mff.cuni.cz/~felcman/Steepest_descent.pdf
2. NMAI042 Numerická matematika
 - IOI Obecná informatika
 - IPSS Programování a softwarové systémy
3. Požadavky ke zkoušce
 - syllabus
SIS, Předměty, NMAI042, Hledej
 - státnice (prospěl s vyznamenáním) Obecná informatika:
MFF > Studium > Bc. a Mgr. studium > Studijní plány > Obecná informatika
<http://www.mff.cuni.cz/studium/bcmgr/ok/ib3a21.htm>
4. Tituly
 - Ph.D.
 - RNDr.
 - Mgr.
 - Bc
5. Studium v zahraničí - ERASMUS
6. Ceny udělované studentům
7. SVOČ
8. Hodnocení učitelů - srozumitelnost
9. Zkouška: čtvrtek 27. května 2021, 09:00 (28. května 2021 - ukončení výuky předmětů, které jsou uvedeny v doporučeném průběhu bakalářského studia pro 6. semestr.)
část písemná, dosažení minimálního předepsaného počtu bodů pro každou otázku
část ústní

Praha, 26. února 2021

J. F.

OBSAH

Úvod	1
1 Aproximace funkcí	2
1.1 Lagrangeův interpolační polynom	4
1.1.1 Chyba Lagrangeovy interpolace	5
1.2 Kubický spline	6
1.2.1 Konstrukce přirozeného kubického spline	7
2 Numerická integrace funkcí	12
2.1 Newtonovy-Cotesovy vzorce	12
2.1.1 Složené Newtonovy-Cotesovy vzorce	14
2.2 Gaußova kvadratura	14
3 Metody řešení nelineárních rovnic	18
3.1 Newtonova metoda	18
3.1.1 Důkaz konvergence Newtonovy metody	19
3.1.2 Řád konvergence	22
3.2 Metoda postupných aproximací pro nelineární rovnice	23
3.3 Kořeny polynomu	23
3.3.1 Hornerovo schema	23
4 Soustavy lineárních rovnic	26
4.1 Podmíněnost matic	26
4.2 Gaußova eliminace	27
4.2.1 Pivotace	28
4.3 Gaußova eliminace jako faktorizační metoda	29
4.4 LU rozklad v obecném případě	31
4.4.1 Vliv zaokrouhlovacích chyb	33
4.5 Choleského rozklad	33
4.6 QR rozklad	34
5 Iterační metody řešení soustav lineárních rovnic	35
5.1 Klasické iterační metody	36
6 Výpočet vlastních čísel matic	42
6.1 Mocninná metoda	42
7 Numerická integrace obyčejných diferenciálních rovnic	44
7.1 Formulace problému	44
7.2 Jednokrokové metody	44
7.2.1 Metody typu Runge-Kutta	46

8 Gradientní metody	49
8.1 Formulace problému	49
Bibliografie	50
Index	51

ÚVOD

Numerická analýza: Studium algoritmů (jednoznačně definovaná konečná posloupnost aritmetických a logických operací) pro řešení problémů spojité matematiky. L.N. Trefethen, Bulletin IMA 1993

Numerická matematika: realizace matematických modelů na počítači

Fyzikální realita \rightarrow matematický model \rightarrow numerické řešení, t.j. realizace matematického modelu na počítači.

Validation (solving the right equations) – verification (solving the equations right)

Literatura k přednášce: ([Quarteroni *et al.*, 2004](#)), ([Ueberhuber, 2000](#)), ([Segethová, 2000](#))

Předpokládané znalosti: Rolleova věta, definice normy funkce, definice seminormy, vlastní čísla, báze lineárního vektorového prostoru, Taylorova věta

APROXIMACE FUNKCÍ

Jedna ze základních úloh numerické matematiky: aproximace dané funkce f jinou funkcí φ

Zadání aproximované funkce - analyticky, nebo je k dispozici

- tabulka hodnot (x_i, f_i) , $x_i, f_i \in \mathbb{R}$, $i = 0, \dots, n$, $n \in \mathbb{N}$, $f_i = f(x_i)$ (viz obr. 1.0.1)
- tabulka hodnot derivací do určitého řádu v uzlech x_i

Pro funkci f definovanou na uzavřeném intervalu $[a, b]$ uvažujeme *dělení intervalu* $[a, b]$, $a = x_0 < x_1, \dots < x_n = b$, $n \in \mathbb{Z}^+ = \{0, 1, \dots\}$ a nazýváme ho *sítí*. x_i , $i = 0, \dots, n$ nazýváme *uzly* (ekvidistantní, je-li $x_i = a + ih$, kde $h \in \mathbb{R}$ je krok sítě.)

Poznámka 1.1 Pojem síť se používá obecně v N -rozměrném prostoru, viz např. (Feistauer *et al.*, 2003, str. 185): Let $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ be a domain. If $N = 2$, then by Ω_h we denote a polygonal approximation of Ω . This means that the boundary $\partial\Omega_h$ of Ω_h consists of a finite number of closed simple piecewise linear curves. For $N = 3$, Ω_h will denote a polyhedral approximation of Ω . For $N = 3$ we set $\Omega_h = \Omega$. The system $\mathcal{D}_h = \{D_i\}_{i \in J}$, where $J \subset \mathbb{Z}^+ = \{0, 1, \dots\}$ is an index set and $h > 0$, will be called a *finite volume mesh* in Ω_h , if D_i , $i \in J$, are *closed line segments* or *closed polygons* or *polyhedrons*, if $N = 1$ or $N = 2$ or 3 , respectively, with mutually disjoint interiors such that

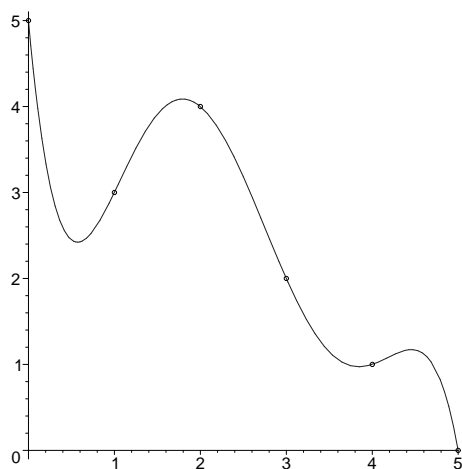
$$\bar{\Omega}_h = \bigcup_{i \in J} D_i.$$

The elements $D_i \in \mathcal{D}_h$ are called *finite volumes*. Two finite volumes D_i , $D_j \in \mathcal{D}_h$ are either disjoint or their intersection is formed by a common part of their boundaries ∂D_i and ∂D_j . If $\partial D_i \cap \partial D_j$ contains at least one straight segment or a plane manifold, if $N = 2$ or 3 , respectively, then we call D_i and D_j *neighbouring finite volumes* (or simply neighbours).

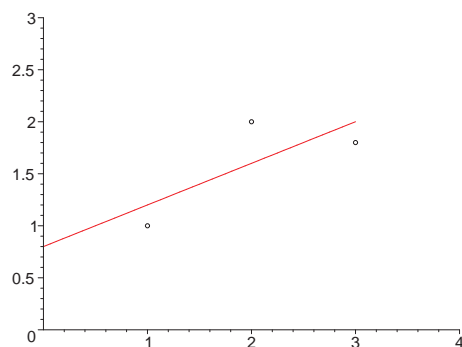
Požadavky na aproximující funkci φ

(A) jednoduchý tvar, snadno vyčíslitelná

- * polynom $\{1, x, x^2, x^3, \dots\}$
- * trigonometrický polynom $\{1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x, \dots\}$
- * racionální funkce
- * exponenciální funkce ae^{bx}



OBR. 1.0.1. Interpoláční polynom nabývající v daných uzlech předepsaných hodnot



OBR. 1.0.2. Proložení přímky třemi body (ve smyslu nejmenších čtverců)

(B) $\varphi^{(j)}(x_i) = f^{(j)}(x_i), \quad \forall i = 0, \dots, n, j = 0, \dots, c_i$ (rovnost hodnot, event. derivací v uzlech)

(C) $\|\varphi - f\|$ ‘malá’, kde $\|\cdot\|$ značí normu

Poznámka 1.2 Od požadavku (B) někdy upouštíme (proložit třemi body přímkou - viz obr. 1.0.2)

Nejčastější způsoby aproximace

1. Interpolace - k funkci f sestrojíme funkci φ z jisté třídy \mathcal{M} splňující (B)
2. Aproximace metodou nejmenších čtverců - k funkci f sestrojíme funkci φ z jisté třídy \mathcal{M} splňující (B) ve smyslu nejmenších čtverců
 - diskrétní případ

$$\sum_{i=0}^n w_i (f(x_i) - \varphi(x_i))^2 = \min_{\psi \in \mathcal{M}} \sum_{i=0}^n w_i (f(x_i) - \psi(x_i))^2$$

kde $w_i > 0, i = 0, \dots, n$ jsou zadaná čísla, zvaná váhy. Název ‘nejmenší čtverce’ je patrný z následujícího příkladu:

Příklad 1.3 Pro dané dělení intervalu $[a, b]$ a dané kladné váhy w_i uvažujme normu funkce f danou vztahem

$$\|f\| := \sqrt{\sum_{i=0}^n w_i (f(x_i))^2}$$

$\varphi \in \mathcal{M}$ se hledá tak, že

$$\|f - \varphi\|^2 = \min_{\psi \in \mathcal{M}} \|f - \psi\|^2$$

- spojitý případ

$$\int_a^b w(x) (f(x) - \varphi(x))^2 dx = \min_{\psi \in \mathcal{M}} \int_a^b w(x) (f(x) - \psi(x))^2 dx$$

w je váhová funkce (skoro všude kladná v $[a, b]$, $w \in L^2(a, b)$). Definice pojmu ‘skoro všude’ a prostoru $L^2(a, b)$ viz např. (Feistauer *et al.*, 2003, strana ...).

3. Čebyševova (stejněměrná) aproximace - k funkci f sestrojíme funkci φ z jisté třídy \mathcal{M} splňující

$$\max_{[a,b]} |\varphi(x) - f(x)| \leq \max_{[a,b]} |\psi(x) - f(x)|$$

pro všechny funkce $\psi \in \mathcal{M}$, kde \mathcal{M} je zvolená množina funkcí.

1.1 Lagrangeův interpolační polynom

Hledáme polynom L_n stupně nejvýše n (píšeme $L_n \in \Pi_n$ - prostor polynomů stupně nejvýše n) takový že

$$L_n(x_i) = f(x_i) \quad i = 0, \dots, n, \quad (1.1.1)$$

x_i - navzájem různé uzly, obecně neekvidistantní. Takový polynom nazveme *Lagrangeovým interpolačním polynomem*.

Věta 1.4 *Nechť x_0, \dots, x_n jsou navzájem různé uzly. Pak existuje právě jeden interpolační polynom $L_n \in \Pi_n$:*

$$L_n(x_i) = f(x_i) \quad i = 0, \dots, n.$$

Důkaz 1. Existence

Uvažujme polynomy

$$l_i(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}$$

(tzv. *Lagrangeovy polynomy*).

Platí

$$\begin{aligned} \alpha) \quad & l_i(x) \in \Pi_n, \\ \beta) \quad & l_i(x_j) = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{Kroneckerovo delta}).$$

Položme

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)l_i(x).$$

2. Jednoznačnost

Nechť $L_n^1, L_n^2 \in \Pi_n$ splňují (viz (1.1.1))

$$L_n^1(x_i) = L_n^2(x_i) = f(x_i) \quad \forall i = 0, \dots, n.$$

Potom $L_n^1 - L_n^2 \in \Pi_n$ je polynom, který má $(n+1)$ různých kořenů. Podle základní věty algebry je $L_n^1 - L_n^2$ nulový polynom.

□

Poznámka 1.5 Položme

$$\omega_{n+1}(x) = (x-x_0)\dots(x-x_n).$$

Potom platí

$$\ell_i(x) = \frac{\omega_{n+1}(x)}{(x-x_i) \cdot \omega'_{n+1}(x_i)},$$

kde čárka označuje derivaci.

2. přednáška1.1.1 *Chyba Lagrangeovy interpolace***Věta 1.6** Nechť $f \in C^{n+1}(I)$, kde I je nejmenší interval obsahující x_0, \dots, x_n, x^* a x_0, \dots, x_n jsou navzájem různé uzly. Nechť $L_n \in \Pi_n$ je Lagrangeův interpolační polynom pro funkci f . Pak $\exists \xi \in I$

$$f(x^*) - L_n(x^*) = \frac{f^{(n+1)}(\xi) \cdot \omega_{n+1}(x^*)}{(n+1)!}$$

(chyba Lagrangeovy interpolace v bodě x^*).

Důkaz Pro $x^* = x_i$ je důkaz zřejmý. Pro $x^* \neq x_i$ uvažujme funkci :

$$F(x) = f(x) - L_n(x) - t \cdot \omega_{n+1}(x)$$

kde $t \in \mathbb{R}$. Platí:

$$F(x_i) = 0 \quad \forall i = 0, \dots, n.$$

Pro vhodnou volbu

$$t := \frac{f(x^*) - L_n(x^*)}{\omega_{n+1}(x^*)} \quad (1.1.2)$$

platí, že $F(x^*) = 0$. F má tedy $n + 2$ nulových bodů (uzly x_i a bod x^*). Podle Rolleovy věty:

$$\begin{aligned} F' & \text{ má aspoň } n + 1 \text{ nulových bodů,} \\ & \vdots \\ F^{(n+1)} & \text{ má aspoň 1 nulový bod, označme ho } \xi. \end{aligned}$$

$$F^{(n+1)}(\xi) = 0 = f^{(n+1)}(\xi) - 0 - t \cdot (n+1)! \cdot \frac{\omega_{n+1}(x^*)}{(n+1)!}$$

kde jsme využili toho, že $(n+1)$ -ní derivace L_n je nulová a $(n+1)$ -ní derivace ω_{n+1} je $(n+1)!$. Dosadíme-li za t ze vztahu (1.1.2), dostaneme

$$f(x^*) - L_n(x^*) = \frac{f^{(n+1)}(\xi) \cdot \omega_{n+1}(x^*)}{(n+1)!}.$$

□

Zkušební otázka 1.1! Chyba Lagrangeovy interpolace

1.2 Kubický spline

Definice 1.7 Necht' je dáno dělení intervalu $[a, b]$, $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ (x_i navzájem různé). Řekneme, že funkce $\varphi : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ je kubický spline, jestliže

1. φ'' je spojitá ($\in C[a, b]$),
2. $\varphi|_{[x_i, x_{i+1}]}$ je kubický polynom, pro $i = 0, 1, \dots, n-1$.

Poznámka 1.8 Spline - elastické pravitko používané při stavbě lodí

Poznámka 1.9 Kubický spline je speciálním případem spline k -tého řádu pro $k = 3$. Důvodem častého použití kubického spline je fakt, že lidské oko je schopné rozlišit ještě změny 2. derivace.

Poznámka 1.10 Kubický spline dobře aproximuje funkci, která popisuje tvar s minimální energií. Popíšeme-li tvar pružné laťky funkcí $y = f(x)$, potom

$$E(y) = \int_a^b \frac{y''(x)}{[1 + (y'(x))^2]^{3/2}} dx$$

měří její ohybovou energii. Lať se deformuje tak, že je tato energie minimální (Hamiltonův princip). Dá se ukázat, že mezi všemi funkcemi z $C^2[a, b]$ aproximuje

kubický spline $\varphi :: \varphi(x_i) = f(x_i)$ velmi dobře funkci y^* , pro kterou se nabývá minima $E(y)$: $\min_y E(y) = E(y^*)$.

Věta 1.11 *Nechť $f \in C^2[a, b]$. Pak pro každý kubický spline φ splňující*

$$\varphi(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, \dots, n,$$

platí

$$\|\varphi\| \leq \|f\|, \quad \text{kde } \|u\|^2 := \int_a^b |u''(x)|^2 dx,$$

jestliže je splněna některá z následujících třech podmínek:

$$\begin{array}{ll} \text{(a)} & \varphi''(a) = 0 = \varphi''(b) \\ \text{(b)} & \varphi'(a) = f'(a) \quad a \quad \varphi'(b) = f'(b) \\ \text{(c)} & \varphi'(a) = \varphi'(b) \quad a \quad \varphi''(a) = \varphi''(b) \end{array} \quad (1.2.1)$$

Poznámka 1.12 (Pozor, $\|\cdot\|$ ve větě 1.11 neznačí normu, ale pouze seminormu v Sobolevově prostoru $H^2(a, b)$, která se obvykle značí $|\cdot|_{H^2(a, b)}$, details viz např. (Feistauer *et al.*, 2003, page ...))

Důkaz Viz cvičení k přednášce. □

Důsledek 1.13 *Ve všech třech případech (a), (b), (c) je kubický spline určen jednoznačně.*

1.2.1 Konstrukce přirozeného kubického spline

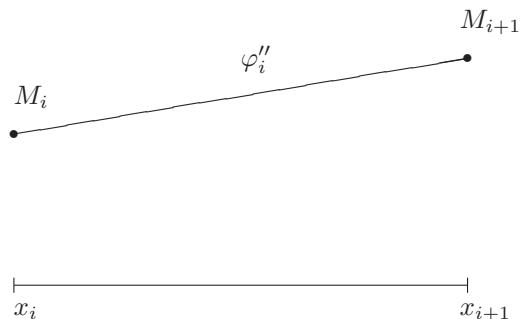
Značení:

$$\begin{array}{ll} f_i := f(x_i) & \forall i = 0, \dots, n, \\ \varphi_i := \varphi|_{[x_i, x_{i+1}]} & \forall i = 0, \dots, n-1, \\ h_i := x_{i+1} - x_i & \forall i = 0, \dots, n-1. \end{array}$$

Kubický polynom φ_i je na intervalu $[x_i, x_{i+1}]$ určen čtyřmi koeficienty. Počet intervalů je n , celkem máme tedy pro určení φ počet *stupňů volnosti* $4n$. Pro tyto stupně volnosti sestavíme příslušné rovnice.

Počet neznámých	$4 \times$ počet intervalů	$4n$
Počet rovnic	$\varphi(x_i) = f(x_i), i = 0, \dots, n$	$n + 1$
	spojitost φ v $x_i, i = 1, \dots, n - 1$	$n - 1$
	spojitost φ' v $x_i, i = 1, \dots, n - 1$	$n - 1$
	spojitost φ'' v $x_i, i = 1, \dots, n - 1$	$\frac{n-1}{4n-2}$

Počet rovnic je o dvě menší než počet neznámých. Doplníme je proto některou z podmínek (1.2.1), (a)–(b). Uvažujme např. podmínku (1.2.1), (a), tj. podmínku

OBR. 1.2.1. Přímka φ_i''

nulových druhých derivací v krajních bodech. Takový spline nazýváme *přirozeným kubickým splinem*. Pro určení přirozeného kubického splinu hledáme φ_i ve vhodném tvaru. Ukazuje se, že efektivní metoda není založena na vyjádření

$$\varphi_i(x) = a_i x^3 + b_i x^2 + c_i x + d_i \quad (\text{NEVHODNÉ viz cvičení})$$

ani na vyjádření

$$\varphi_i(x) = a_i(x-x_i)^3 + b_i(x-x_i)^2 + c_i(x-x_i) + d_i \quad (\text{MÉNĚ VHODNÉ viz cvičení})$$

ale na vyjádření pomocí tzv. *momentů*, což jsou hodnoty druhé derivace φ v uzlech. Označme je M_i :

$$M_i := \varphi''(x_i), \quad i = 0, \dots, n$$

a předpokládejme, že tyto momenty známe. Později ukážeme, jak je určit. Platí

φ_i – kubický polynom

φ_i' – parabola

φ_i'' – přímka

Z předpokladu spojitosti druhé derivace φ v uzlech dostáváme

$$\begin{aligned} M_i &= \varphi_i''(x_i), \\ M_{i+1} &= \varphi_i''(x_{i+1}). \end{aligned}$$

Je tedy φ_i'' přímka, procházející body (x_i, M_i) a (x_{i+1}, M_{i+1}) (viz obr. 1.2.1).

$$\begin{aligned}\varphi_i''(x) &= \frac{(x - x_i) \cdot M_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} + \frac{M_i \cdot (x - x_{i+1})}{x_i - x_{i+1}}, \\ \varphi_i''(x) &= -\frac{M_i}{h_i} \cdot (x - x_{i+1}) + \frac{M_{i+1}}{h_i} \cdot (x - x_i).\end{aligned}$$

Integrací odvodíme

$$\begin{aligned}\varphi_i'(x) &= -\frac{M_i}{2h_i} \cdot (x - x_{i+1})^2 + \frac{M_{i+1}}{2h_i} \cdot (x - x_i)^2 + A_i, \\ \varphi_i(x) &= -\frac{M_i}{6h_i} \cdot (x - x_{i+1})^3 + \frac{M_{i+1}}{6h_i} \cdot (x - x_i)^3 + A_i(x - x_i) + B_i.\end{aligned}\quad (1.2.2)$$

vhodný rozpis integrační konstanty \uparrow

Ve vyjádření φ_i ve tvaru (1.2.2) nejprve určíme koeficienty A_i, B_i , $i = 0, \dots, n-1$ pomocí momentů a potom sestavíme rovnice pro momenty. Využijeme k tomu podmínky

$$\begin{aligned}\varphi_i(x_i) &= f_i, \\ \varphi_i(x_{i+1}) &= f_{i+1}, \quad i = 0, \dots, n-1.\end{aligned}$$

(Dvě rovnice pro dvě neznámé A_i, B_i , $i = 0, \dots, n-1$.) Dostaneme

$$\begin{aligned}\varphi_i(x_i) &= \frac{M_i}{6} \cdot h_i^2 + B_i = f_i, \\ &\rightarrow \quad \mathbf{B_i = f_i - \frac{M_i}{6} \cdot h_i^2}, \\ \varphi_i(x_{i+1}) &= \frac{M_{i+1}}{6} \cdot h_i^2 + A_i h_i + f_i - \frac{M_i}{6} \cdot h_i^2 = f_{i+1}, \\ &\rightarrow \quad \mathbf{A_i = \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} + \frac{M_i - M_{i+1}}{6} \cdot h_i}.\end{aligned}$$

Rovnice pro momenty sestavíme ekvivalentním vyjádřením podmínky spojitosti derivace kubického spline v uzlech:

$$\varphi'_{i-1}(x_i) = \varphi'_i(x_i), \quad i = 1, \dots, n.$$

Připomeňme si tvar φ'_i

$$\varphi'_i(x) = -\frac{M_i}{2h_i} \cdot (x - x_{i+1})^2 + \frac{M_{i+1}}{2h_i} \cdot (x - x_i)^2 + A_i$$

resp. φ'_{i-1}

$$\varphi'_{i-1}(x) = -\frac{M_{i-1}}{2h_{i-1}} \cdot (x - x_i)^2 + \frac{M_i}{2h_{i-1}} \cdot (x - x_{i-1})^2 + A_{i-1}.$$

S využitím vyjádření pro A_i , resp. A_{i-1} pomocí momentů dostaneme

$$\varphi'_{i-1}(x_i) = 0 + \frac{M_i}{2h_{i-1}} \cdot h_{i-1}^2 + \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} + \frac{M_{i-1} - M_i}{6} \cdot h_{i-1}$$

$$= -\frac{M_i}{2h_i} \cdot h_i^2 + 0 + \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} + \frac{M_i - M_{i+1}}{6} \cdot h_i = \varphi_i'(x_i).$$

Protože konstruujeme přirozený kubický spline, je $M_0 = \varphi''(x_0) = 0 = \varphi''(x_n) = M_n$ a dostáváme tak $n - 1$ rovnic ($i = 1, \dots, n - 1$) pro neznáme momenty M_1, M_2, \dots, M_{n-1} . Tyto rovnice lze přepsat ve tvaru

$$\frac{h_{i-1}}{6} M_{i-1} + \underbrace{\left(\frac{h_{i-1}}{2} - \frac{h_{i-1}}{6} + \frac{h_i}{2} - \frac{h_i}{6} \right)}_{\frac{h_{i-1}+h_i}{3}} M_i + \frac{h_i}{6} M_{i+1} = \underbrace{-\frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} + \frac{f_{i+1} - f_i}{h_i}}_{g_i}.$$

Maticový zápis vede na soustavu s třídiagonální maticí.

$$\begin{pmatrix} \frac{h_0+h_1}{3} & \frac{h_1}{6} & & & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & & & & & & \\ & & & \frac{h_{i-1}}{6} & & & & & & \\ & & & & \frac{h_{i-1}+h_i}{3} & & & & & \\ & & & & & \frac{h_i}{6} & & & & \\ & & & & & & \ddots & \ddots & & \\ & & & & & & & \frac{h_{n-2}}{6} & & \\ & & & & & & & & \frac{h_{n-2}+h_{n-1}}{3} & \\ & & & & & & & & & M_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} M_1 \\ \vdots \\ M_{i-1} \\ M_i \\ M_{i+1} \\ \vdots \\ M_{n-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_{i-1} \\ g_i \\ g_{i+1} \\ \vdots \\ g_{n-1} \end{pmatrix}$$

Zkušební otázka 1.2! Konstrukce přirozeného kubického spline.

Příklad 1.14 Pro ekvidistantní dělení s krokem h má matice soustavy tvar

$$\frac{h}{6} \begin{pmatrix} 4 & 1 & & & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & & & & \\ & & 1 & 4 & 1 & & & & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & \\ & & & & & 1 & 4 & & & \\ & & & & & & & 1 & 4 & \end{pmatrix}$$

Při vyšetřování řešitelnosti této soustavy lze využít následující definici a větu z algebry:

Definice 1.15 Řekněme, že matice \mathbb{A} typu $n \times n$, $n \geq 2$ je ostře diagonálně dominantní (ODD), jestliže

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

Věta 1.16 Necht' $\mathbb{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je ODD. Pak \mathbb{A} je nesignulární.

Důkaz pomocí Geršgorinových kruhů, viz (Quarteroni *et al.*, 2004, str. 184).

\mathbb{A} je nesingulární $\Leftrightarrow \det \mathbb{A} \neq 0 \Leftrightarrow$ rovnice $\det(\mathbb{A} - \lambda \mathbb{I}) = 0$ nemá kořen $\lambda = 0 \Leftrightarrow$ nula není vlastním číslem matice \mathbb{A} . Necht' λ je vlastní číslo matice \mathbb{A}

$$\mathbb{A}x = \lambda x \quad y := \frac{x}{\|x\|}, \quad \|x\| := \max_i |x_i|$$

$$\mathbb{A}y = \lambda y \quad |y_i| \leq 1, \quad \exists i_0 :: |y_{i_0}| = 1$$

$$\sum_{j \neq i_0} a_{i_0 j} y_j + a_{i_0 i_0} y_{i_0} = \lambda y_{i_0}$$

$$\left| \sum_{j \neq i_0} a_{i_0 j} y_j \right| = |\lambda - a_{i_0 i_0}| |y_{i_0}|$$

$$|\lambda - a_{i_0 i_0}| \leq \sum_{j \neq i_0} |a_{i_0 j}|$$

(Geršgorinův kruh o středu $a_{i_0 i_0}$ a poloměru $\sum_{j \neq i_0} |a_{i_0 j}|$)

Kdyby $\lambda = 0$ bylo vlastním číslem

$$|a_{i_0 i_0}| \leq \sum_{j \neq i_0} |a_{i_0 j}| \quad \text{Spor s ODD}$$

$\lambda = 0$ tedy není vlastní číslo a matice \mathbb{A} je nesingulární. \square

Matice soustavy rovnic pro momenty je ODD, soustava je tedy podle výše uvedené věty jednoznačně řešitelná a protože matice soustavy je třídiagonální, lze pro řešení použít např. Gaußovu eliminaci.

NUMERICKÁ INTEGRACE FUNKCÍ

3. přednáška

Nechť je dáno dělení intervalu $[a, b]$, $a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_n \leq b$ (x_i navzájem různé). Označme $h = \max_{i \in \{0, \dots, n-1\}} |x_{i+1} - x_i|$.

$$\text{Cíl: } I(f) = \int_a^b f(x) dx \approx I_h(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i). \quad (2.0.1)$$

Vzorec

$$I_h(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$$

se nazývá *kvadraturní formule*, α_i jsou *koeficienty* kvadraturní formule a x_i jsou *uzly* kvadraturní formule. Motivace hledání aproximace určitého integrálu ve tvaru lineární kombinace hodnot funkce f v uzlech x_i je zřejmá z následujícího odstavce.

2.1 Newtonovy-Cotesovy vzorce

Pro dané $n \in \mathbb{N}$ uvažujme ekvidistantní dělení intervalu $[a, b]$ s krokem $h = \frac{b-a}{n}$, $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$. Aproximujeme-li funkci f Lagrangeovým interpolačním polynomem L_n pro uzly x_0, \dots, x_n , lze určitý integrál z funkce f aproximovat následujícím způsobem:

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b L_n(x) dx = \\ &\int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) \overbrace{\frac{(x-x_0)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_0)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}}^{\ell_i(x)} dx = \\ &\sum_{i=0}^n \underbrace{\int_a^b \ell_i(x) dx}_{\alpha_i} f(x_i) \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

Tento vzorec nazýváme pro ekvidistantní uzly Newtonův-Cotesův. Pro výpočet koeficientů α_i použijeme následující substituci

$$\begin{aligned} \text{subst. } x &= a + th \\ x_i &= a + ih, \quad h = \frac{b-a}{n} \end{aligned}$$

$$\alpha_i := \int_a^b \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{(x-x_j)}{(x_i-x_j)} dx = \frac{b-a}{n} \int_0^n \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{(t-j)}{(i-j)} dt \quad (2.1.2)$$

Z konstrukce Lagrangeovy interpolace L_n funkce $f \in \Pi_n$ plyne, že $L_n(x) = f(x)$, a tedy N-C vzorec je přesný pro polynomy stupně nejvýše n . To nás vede k následující definici.

Definice 2.1 Řekneme, že kvadrurní formule $\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$ má řád přesnosti m , jestliže $m \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ je maximální číslo takové, že

$$\int_a^b p(x) dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i p(x_i) \quad \forall p \in \Pi_m. \quad (2.1.3)$$

Zkušební otázka 2.1 Řád kvadrurní formule.

Lemma 2.2 Je-li kvadrurní formule $\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$ symetrická, t.j. pro $i = 0, \dots, n$ platí

$$\begin{aligned} b - x_{n-i} &= x_i - a, \\ \alpha_i &= \alpha_{n-i}, \end{aligned}$$

a je-li její řád $\geq n$, n sudé, pak je její řád $\geq n+1$.

Lemma 2.3 Newtonův-Cotesův vzorec je symetrická kvadrurní formule.

Důsledek 2.4 Pro n sudé je řád N-C vzorce $\geq n+1$.

Zkušební otázka 2.2 Odvoďte Newtonův-Cotesův vzorec.

Lemma 2.5 (Odhad chyby lichoběžníkového pravidla)

Nechť $f \in C^2[a, b]$. Označme $T_h(f)$ N-C vzorec pro $n = 1$ (lichoběžníkové pravidlo). Pak $\exists \xi \in [a, b]$, \therefore (při značení $I(f) = \int_a^b f(x) dx$)

$$I(f) - T_h(f) = -\frac{f''(\xi)}{2} \cdot \frac{h^3}{6}, \quad h = (b-a). \quad (2.1.4)$$

Lemma 2.6 (Odhad chyby Simpsonova pravidla)

Nechť $f \in C^3[a, b]$. Označme $S_h(f)$ N-C vzorec pro $n = 2$ (Simpsonovo pravidlo). Pak $\exists \xi \in [a, b]$, \therefore

$$I(f) - S_h(f) = -\frac{h^5}{90} \cdot f'''(\xi), \quad h = \frac{(b-a)}{2}. \quad (2.1.5)$$

Definice 2.7 (zbytek kvadrurního vzorce) Rozdíl

$$E_h(f) = I(f) - I_h(f),$$

kde

$$I(f) = \int_a^b f(x) dx, \quad I_h(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i),$$

nazýváme zbytek kvadrurního vzorce.

2.1.1 Složené Newtonovy–Cotesovy vzorce

Newtonovy–Cotesovy vzorce lze také aplikovat tak, že interval $[a, b]$ rozdělíme na n ekvidistantních subintervalů $[x_i, x_{i+1}]$ velikosti h a na každém z těchto subintervalů použijeme Newtonův–Cotesův vzorec pro $m + 1$ ekvidistantních uzlů $x_i = x_{i_0} < \dots < x_{i_m} = x_{i+1}$ s krokem H

$$x_i = a + ih, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad i = 0, \dots, n, \quad x_{i_j} = x_i + jH, \quad H = \frac{h}{m} \quad n, m \in \mathbb{N}$$

$$I(f) := \sum_{i=0}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} f(x) dx \approx \sum_{i=0}^{n-1} I_H^i(f) = \sum_{i=0}^{n-1} \sum_{j=0}^m \alpha_{i_j} f(x_{i_j}) =: I_H(f)$$

Věta 2.8 (složené N-C vzorce) Necht $f \in C^{m+1}[a, b]$. Pak pro složené N-C vzorce platí

$$|I(f) - I_H(f)| \leq cH^{m+1}, \quad (2.1.6)$$

kde $c > 0$ je konstanta nezávislá na H .

Důkaz plyne z odhadu chyby Lagrangeova interpolačního polynomu □

2.2 Gaußova kvadratura

Víme, že N-C vzorce mají řád aspoň n (pro n sudé dokonce aspoň $n + 1$). Jakého řádu může být formule typu $\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$? Uvažujme pro dané dělení intervalu $[a, b]$, $a \leq x_0 < \dots < x_n \leq b$ kvadrurní formuli

$$I_h(f) = \sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i). \quad (2.2.1)$$

Lemma 2.9 (Řád kvadrurní formule) Řád kvadrurní formule (2.2.1) je nejvyšší $2n + 1$.

Důkaz Uvažujme polynom $\tilde{p}(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)^2 \in \Pi_{2n+2}$. Tento polynom je nezáporná funkce na intervalu $[a, b]$ a platí pro něho

$$\int_a^b \tilde{p}(x) > 0.$$

Kvadrurní formule typu (2.2.1) dává pro tento polynom

$$\sum_{i=0}^n \alpha_i \tilde{p}(x_i) = 0.$$

Pro polynom \tilde{p} není tedy kvadrurní formule (2.2.1) přesná a její řád je tedy nejvýše $2n + 1$. \square

GauŤova kvadratura je způsob konstrukce vzorce $\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$, který je přesný pro všechny polynomy stupně nejvýše $2n + 1$.

Definice 2.10 (skalární součin polynomů) Skalární součin v $C[a, b]$ je definován

$$(u, v) = \int_a^b u(x)v(x) dx. \quad (2.2.2)$$

Definice 2.11 Množina normovaných polynomů

$$\tilde{\Pi}_n = \{p \in \Pi_n; \quad p(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_0\}. \quad (2.2.3)$$

Myšlenka konstrukce GauŤovy kvadratury:

x_i (uzly): kořeny polynomu p_{n+1} z množiny ortogonálních polynomů $\{p_0, p_1, \dots, p_{n+1}\}$,

α_i (koeficienty): určíme tak, aby $\int_a^b q(x) dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i q(x_i) \quad \forall q \in \Pi_{2n+1}$.

Věta 2.12 (Ortogonalní polynomy) Existují jednoznačně určené polynomy p_i , pro které platí

$$1. \quad p_i \in \tilde{\Pi}_i, \quad i \in \mathbb{N} \cup \{0\},$$

$$(p_i, p_j) = 0, \quad i \neq j, \quad (\text{pozn. } p_0(x) = 1)$$

2. Kořeny x_0, \dots, x_n polynomu p_{n+1} , $n \in \mathbb{N} \cup \{0\}$, jsou reálné, jednoduché a leží v (a, b)

3.

$$A = \begin{pmatrix} p_0(x_0) & p_0(x_1) & \dots & p_0(x_n) \\ p_1(x_0) & p_1(x_1) & \dots & p_1(x_n) \\ & & \ddots & \\ p_n(x_0) & p_n(x_1) & \dots & p_n(x_n) \end{pmatrix} \quad \text{je nesingulární.}$$

Důkaz viz cvičení k přednášce. \square

S využitím ortogonálních polynomů p_0, \dots, p_{n+1} a kořenů x_i polynomu p_{n+1} určíme koeficienty α_i Gaußovy kvadraturní formule tak, aby platilo:

$$\int_a^b q(x) dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i q(x_i), \quad \forall q \in \Pi_{2n+1}. \quad (2.2.4)$$

K tomu vyjádříme polynom q ve tvaru

$$q(x) = r(x)p_{n+1}(x) + s(x), \quad r, s \in \Pi_n,$$

(dělení polynomu q polynomem p_{n+1}) a polynomy $r(x), s(x) \in \Pi_n$ vyjádříme jako lineární kombinaci ortogonálních polynomů (existence takového vyjádření viz cvičení k přednášce), speciálně nechť

$$s(x) = \sum_{j=0}^n \gamma_j p_j(x).$$

Na základě tohoto vyjádření má výraz na levé straně v (2.2.4) tvar

$$\begin{aligned} \int_a^b q(x) dx &= \underbrace{\int_a^b r(x)p_{n+1}(x) dx}_{=0} + \int_a^b s(x) dx \\ &= \int_a^b \sum_{j=0}^n \gamma_j p_j(x) dx = \int_a^b \sum_{j=0}^n \gamma_j \overbrace{p_0(x)}{=1} p_j(x) dx \\ &= \sum_{j=0}^n \gamma_j \int_a^b p_0(x)p_j(x) dx = \gamma_0 \int_a^b p_0(x)p_0(x) dx = \gamma_0 \int_a^b dx. \end{aligned}$$

Levá strana v (2.2.4) je tedy rovna

$$\gamma_0(b-a).$$

Pravá strana v (2.2.4) má na základě výše uvedených vyjádření tvar

$$\sum_{i=0}^n \alpha_i \underbrace{[r(x_i)p_{n+1}(x_i) + s(x_i)]}_{=0} = \sum_{i=0}^n \alpha_i \sum_{j=0}^n \gamma_j p_j(x_i).$$

Vidíme, že levou a pravou stranu v (2.2.4) lze tedy vyjádřit jako lineární kombinací jistých výrazů s koeficienty γ_j

$$\begin{aligned} &\gamma_0(b-a) + \gamma_1 \cdot 0 + \dots + \gamma_n \cdot 0 \\ &= \gamma_0 \sum_{i=0}^n p_0(x_i)\alpha_i + \gamma_1 \sum_{i=0}^n p_1(x_i)\alpha_i + \dots + \gamma_n \sum_{i=0}^n p_n(x_i)\alpha_i \end{aligned}$$

Porovnáním výrazů u koeficientů γ_j na levé a pravé straně dostaneme rovnice pro určení hledaných koeficientů α_i :

$$\left. \begin{array}{l} \sum_{i=0}^n p_0(x_i)\alpha_i = (b-a) \\ \sum_{i=0}^n p_1(x_i)\alpha_i = 0 \\ \vdots \\ \sum_{i=0}^n p_n(x_i)\alpha_i = 0 \end{array} \right\} \Leftrightarrow \begin{pmatrix} p_0(x_0) & \cdots & p_0(x_n) \\ p_1(x_0) & \cdots & p_1(x_n) \\ & \ddots & \\ p_n(x_0) & \cdots & p_n(x_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b-a \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

Z hlediska stability je výhodné, že koeficienty α_i Gaußova kvadrurního vzorce $\sum_{i=0}^n \alpha_i f(x_i)$ jsou kladné.

Věta 2.13 (pozitivita α_i) *Koeficienty α_i Gaußova kvadrurního vzorce jsou kladné.*

Důkaz Položme:

$$\begin{aligned} \tilde{p}_k(x) &= \prod_{i=0, i \neq k}^n (x - x_i)^2 \in \Pi_{2n} \\ 0 &< \int_a^b \tilde{p}_k(x) dx = \sum_{i=0}^n \alpha_i \tilde{p}_k(x_i) = \alpha_k \underbrace{\tilde{p}_k(x_k)}_{>0} \\ &\Rightarrow \alpha_k \text{ kladné } \forall k = 0, 1, \dots, n. \end{aligned}$$

□

Zkušební otázka 2.3! Odvoďte Gaußův kvadrurní vzorec řádu $2n + 1$ na intervalu $[a, b]$. Odvoďte Gaußův kvadrurní vzorec řádu 3 na intervalu $[-1, 1]$ (uvažujte ortogonální polynomy $\{1, x, x^2 - \frac{1}{3}\}$).

METODY ŘEŠENÍ NELINEÁRNÍCH ROVNIC

Nechť je dáno nelineární zobrazení

$$F : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N.$$

Hledáme $\alpha :: F(\alpha) = 0$.

Metody pro řešení výše uvedené úlohy jsou většinou iterační. Cíl je generovat posloupnost $\{x^{(k)}\}$ takovou, že $\lim x^{(k)} = \alpha$, kde $F(\alpha) = 0$.

3.1 Newtonova metoda

Problém $F(x) = 0$ nahradíme posloupností lineárních problémů $L_k(x) = 0$, $L_k : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N, k = 0, 1, \dots$, takových, že jejich řešení tvoří posloupnost konvergující k řešení problému $F(x) = 0$.

$$\alpha \approx x^{(k+1)}, \text{ kde } L_k(x^{(k+1)}) = 0.$$

Nechť $x^{(0)}$ je dáno (později ukážeme, jak ho volit). Pro danou aproximaci $x^{(k)}$ uvažujeme $L_k(x)$ jako lineární část Taylorova rozvoje zobrazení F v bodě $x^{(k)} \in \mathbb{R}^N$ ($J(x)$ značí Jakobihu matici zobrazení F v bodě x):

$$F(x) = \underbrace{F(x^{(k)}) + J(x^{(k)})(x - x^{(k)})}_{L_k(x)} + O(|x - x^{(k)}|^2).$$

(za předpokladu dostatečné hladkosti zobrazení F). Nelineární problém nahradíme problémem lineárním

$$\{F(x) = 0\} \approx \underbrace{\{F(x^{(k)}) + J(x^{(k)})(x - x^{(k)})\}}_{L_k(x)} = 0 \quad (3.1.1)$$

$$\text{řešení } \alpha \text{ nelin. pb. } \approx \text{aproximujeme řešením } x^{(k+1)} \text{ lin. pb.} \quad (3.1.2)$$

$$\alpha \approx x^{(k+1)} := x^{(k)} - J^{-1}(x^{(k)})F(x^{(k)}) \quad (3.1.3)$$

Vzorec v (3.1.3), kterým je definována $(k+1)$ -ní aproximace $x^{(k+1)}$ řešení nelineárního problému je formální, ve skutečnosti se inverzní matice nepočítá a algoritmus má následující dva kroky:

Algoritmus:

1. $J(x^{(k)}) \underbrace{(x - x^{(k)})}_{\delta x^{(k)}} = -F(x^{(k)})$ - řešíme lineární úlohu pro $\delta x^{(k)}$

2. $x^{(k+1)} := x^{(k)} + \delta x^{(k)}$ - provedeme update předchozí aproximace.

Pro $N = 1$ (nelineární skalární rovnice pro jednu neznámou) má Newtonova metoda názorný geometrický význam. Nelineární funkci $f(x)$ nahradíme lineární funkcí (přímkou), která je tečnou ke grafu funkce f v bodě $(x^{(k)}, f(x^{(k)}))$ (má tedy směrnici $f'(x^{(k)})$ a prochází bodem $(x^{(k)}, f(x^{(k)}))$). V tomto případě se Newtonova metoda nazývá metodou tečen.

$N = 1$:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}, \quad x^{(0)} \text{ dáno, } f'(x^{(k)}) \neq 0.$$

Zkušební otázka 3.1! Odvoďte Newtonovu metodu pro soustavy nelineárních rovnic a její algoritmicizaci. Popište algoritmus v případě jedné skalární rovnice.

Způsob, jak nahradit funkci f přímkou procházející bodem $(x^{(k)}, f(x^{(k)}))$ není jediný. Další možnosti jsou metoda sečen, jednobodová metoda sečen nebo metoda regula falsi (viz cvičení k přednášce).

Poznámka 3.1 Newtonova metoda je speciálním případem náhrady funkce f lineární funkcí

$$l_k(x) := f(x^{(k)}) + (x - x^{(k)})q_k,$$

kde směrnice q_k se volí

$$q_k := f'(x^{(k)}).$$

5. přednáška

3.1.1 Důkaz konvergence Newtonovy metody

Věta 3.2 (Konvergence Newtonovy metody pro soustavy) *Nechť $F \in C(D)$, $D \subset \mathbb{R}^N$ konvexní, otevřená množina, která obsahuje $\alpha :: F(\alpha) = 0$. Nechť $\exists J^{-1}(\alpha)$, nechť $\exists R > 0, c > 0, L > 0$:*

$$\begin{aligned} \|J^{-1}(\alpha)\| &\leq c, \\ \underbrace{\|J(x) - J(y)\|}_{\text{maticová norma}} &\leq L \underbrace{\|x - y\|}_{\text{vekt. norma}} \quad \forall x, y \in B(\alpha, R), \end{aligned}$$

kde $B(\alpha, R)$ je koule o středu α a poloměru R . Potom $\exists r, \forall x^{(0)} \in B(\alpha, r)$, posloupnost 3.1.3 je jednoznačně definována a konverguje k α a platí

$$\|\alpha - x^{(k+1)}\| \leq cL \|\alpha - x^{(k)}\|^2 \quad (3.1.4)$$

Motivace: $N = 1$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} \quad \text{Newtonova metoda}$$

Z Taylorova rozvoje dostáváme:

$$f(\alpha) = f(x^{(k)}) + f'(x^{(k)})(\alpha - x^{(k)}) + \frac{f''(\xi)(\alpha - x^{(k)})^2}{2}.$$

Zajímá nás chyba $(\alpha - x^{(k+1)})$. Chceme ukázat, že $|\alpha - x^{(k+1)}| \rightarrow 0$. Odečtením α od obou stran vzorce pro Newtonovu metodu získáme vyjádření

$$\alpha - x^{(k+1)} = \alpha - x^{(k)} + \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})}.$$

Úpravou Taylorova rozvoje (uvědomíme-li si, že $f(\alpha) = 0$) dostaneme

$$0 = \frac{f(x^{(k)})}{f'(x^{(k)})} + (\alpha - x^{(k)}) + \frac{f''(\xi)(\alpha - x^{(k)})^2}{2 \cdot f'(x^{(k)})}.$$

Z předchozích dvou rovnic snadno nahlédneme, že platí

$$\alpha - x^{(k+1)} = -\frac{f''(\xi)(\alpha - x^{(k)})^2}{2 \cdot f'(x^{(k)})}.$$

Předpokládejme nyní, že existuje konstanta \tilde{c} taková, že podíl derivací na pravé straně předchozího výrazu lze odhadnout

$$\left| \frac{f''(\xi)}{2 \cdot f'(x^{(k)})} \right| < \tilde{c} \quad \forall \xi \quad \forall x^{(k)}.$$

Potom dostaneme

$$\begin{aligned} |\alpha - x^{(k+1)}| &\leq \tilde{c} |\alpha - x^{(k)}|^2 \leq \tilde{c} \left(\tilde{c} |\alpha - x^{(k-1)}|^2 \right)^2 = \frac{1}{\tilde{c}} \left(\tilde{c} |\alpha - x^{(k-1)}| \right)^4 \\ &\leq \dots \leq \frac{1}{\tilde{c}} \left(\tilde{c} |\alpha - x^{(0)}| \right)^{2^{k+1}}. \end{aligned}$$

Pravá strana konverguje k nule pro $k \rightarrow +\infty$ za předpokladu

$$\tilde{c} |\alpha - x^{(0)}| < 1, \text{ tj. jestliže je } x^{(0)} \text{ dostatečně blízko k } \alpha.$$

Pro důkaz konvergence Newtonovy metody pro jednu skalární rovnici jsme tedy využili tyto předpoklady

1. $x^{(0)}$ dostatečně blízko α ,
2. f'' omezená shora
3. $\frac{1}{f'}$ omezená shora (tj. předpokládáme $f'(\alpha) \neq 0$),

kteří korespondují s předpoklady Věty 3.2. Jak, to je patrné z následujícího důkazu.

Důkaz věty 3.2. $x^{(0)}$ zvolíme v $B(\alpha, r)$, kde r učíme tak, aby $J^{-1}(x^{(0)})$ existovala. (Jinými slovy, $x^{(0)}$ volíme **dostatečně blízko** α .) K tomu využijeme následující tvrzení z algebry:

Lemma 3.3

$$\|\mathbb{A}\| < 1 \Rightarrow (\mathbb{I} - \mathbb{A})^{-1} \quad \text{existuje a platí}$$

$$\|(\mathbb{I} - \mathbb{A})^{-1}\| \leq \frac{1}{1 - \|\mathbb{A}\|}.$$

Důkaz viz cvičení k přednášce. □

Definujme matici

$$\mathbb{A} := \mathbb{I} - J^{-1}(\alpha)J(x^{(0)})$$

kde $x^{(0)}$ zvolíme tak (blízko α), aby $\|\mathbb{A}\| < 1$, konkrétně zvolíme $x^{(0)}$ tak, aby

$$\|\mathbb{A}\| \leq \frac{1}{2}.$$

K tomu využijeme předpoklady Věty 3.2 týkající se odhadu inverze Jacobiho matice v bodě α a lipschitzovskosti Jacobiho matice:

$$\left\| \overbrace{\mathbb{I} - J^{-1}(\alpha)J(x^{(0)})}^{\mathbb{A}} \right\| = \|J^{-1}(\alpha)(J(\alpha) - J(x^{(0)}))\| \leq cL \|\alpha - x^{(0)}\|. \quad (3.1.5)$$

$x^{(0)}$ zvolíme tak, aby poslední výraz v (3.1.5) $\leq \frac{1}{2}$. Tím dostáváme podmínku na $x^{(0)}$:

$$\|\alpha - x^{(0)}\| \leq \frac{1}{cL} \text{ a zároveň } \|\alpha - x^{(0)}\| \leq R \text{ (platnost podmínky lipschitzovskosti).}$$

Pro r dostáváme

$$r := \min \left(\frac{1}{2cL}, R \right).$$

V množině $B(\alpha, r)$ existuje podle výše uvedeného tvrzení z algebry $J^{-1}(x^{(0)})$. To plyne ze vztahů

$$(\mathbb{I} - \mathbb{A}) = J^{-1}(\alpha)J(x^{(0)}), \quad (\mathbb{I} - \mathbb{A})^{-1} = J^{-1}(x^{(0)})J(\alpha).$$

Lze tedy spočítat první iteraci Newtonovy metody a odhadnout její chybu:

$$\alpha - x^{(1)} = \alpha - x^{(0)} + J^{-1}(x^{(0)})F(x^{(0)}).$$

Úpravou Taylorova rozvoje (uvědomíme-li si, že $F(\alpha) = 0$) dostaneme

$$0 = F(\alpha) = F(x^{(0)}) + J(x^{(0)})(\alpha - x^{(0)}) + \text{zbytek},$$

$$0 = J^{-1}(x^{(0)})F(x^{(0)}) + (\alpha - x^{(0)}) + J^{-1}(x^{(0)}) \text{zbytek}.$$

S využitím odhadu zbytku Taylorova rozvoje dostaneme

$$\|\alpha - x^{(1)}\| \leq \|J^{-1}(x^{(0)})\| \overbrace{\frac{1}{2}L \|\alpha - x^{(0)}\|^2}^{\text{odhad zbytku}}$$

a důkaz dokončíme pomocí odhadu normy inverzní matice

$$\|J^{-1}(x^{(0)})\| = \left\| \underbrace{J^{(-1)}(x^{(0)})J(\alpha)J^{(-1)}(\alpha)}_{(\mathbb{I}-\mathbb{A})^{-1}} \right\| \leq \frac{1}{1 - \underbrace{\|\mathbb{A}\|}_{\leq \frac{1}{2}}} c \leq 2c.$$

Pro odhad chyby máme tedy vztah

$$\|\alpha - x^{(1)}\| \leq cL \|\alpha - x^{(0)}\|^2 = \underbrace{(cL \|\alpha - x^{(0)}\|)}_{\leq \frac{1}{2}} \|\alpha - x^{(0)}\|,$$

z něhož plyne dále indukcí konvergence Newtonovy metody. \square

Zkušební otázka 3.2 Dokažte větu o konvergenci Newtonovy metody.

Poznámka 3.4 Modifikace Newtonovy metody:

- Jacobiho matice se nemění pro $p \geq 2$ kroků
- nepřesné řešení soustavy lin. rovnic
- vyčíslení Jacobiho matice pomocí diferencí $f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$

3.1.2 Řád konvergence

Definice 3.5 (řád konvergence iterační metody pro řešení $F(x) = 0$) Řekneme, že posloupnost $\{x^{(k)}\}$ generovaná numerickou metodou konverguje k α s řádem $p \geq 1$, pokud $\exists c > 0$

$$\frac{\|\alpha - x^{(k+1)}\|}{\|\alpha - x^{(k)}\|^p} \leq c \quad \forall k \geq k_0.$$

V takovém případě se numerická metoda nazývá řádu p .

Věta 3.2 říká, že Newtonova metoda je kvadraticky konvergentní,

$$\|\alpha - x^{(k+1)}\| \leq cL \|\alpha - x^{(k)}\|^2,$$

pokud je $x^{(0)}$ dostatečně blízko α a pokud je $J(\alpha)$ nesingulární.

3.2 Metoda postupných aproximací pro nelineární rovnice

Metoda postupných aproximací je založena na faktu, že pro dané zobrazení $F : M \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ je vždy možné transformovat problém $F(x) = 0$ na ekvivalentní problém $x - \phi(x) = 0$, kde pomocná funkce ϕ je volena tak, aby $\phi(\alpha) = \alpha$ právě když $F(\alpha) = 0$. Nalezení nulových bodů zobrazení F se tak převede na nalezení *pevného bodu* zobrazení ϕ , které se realizuje pomocí následujícího algoritmu:

Dáno $x^{(0)}, x^{(k+1)} := \phi(x^{(k)}), k \geq 0$.

Definice 3.6 (*kontrahující zobrazení*) Řekneme, že zobrazení $G : D \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^n$ je kontrahující na $D_0 \subset D$, jestliže $\exists L < 1$::

$$\|G(x) - G(y)\| \leq L \|x - y\| \quad \forall x, y \in D_0.$$

Věta 3.7 (*věta o pevném bodě*) Nechť $G : D \subset \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ kontrahující na uzavřené množině $D_0 \subset D, G(x) \in D_0 \quad \forall x \in D_0$. Pak G má právě jeden pevný bod. Tento bod je limitou posloupnosti $x^{(k+1)} = \phi(x^{(k)}), x^{(0)} \in D_0$ libovolné.

Důkaz jednoznačnost, existence (Cauchyovská posloupnost, spojitost G), viz cvičení k přednášce. \square

Poznámka 3.8 Newtonova metoda jako speciální případ věty o pevném bodě. (Viz cvičení k přednášce.)

6. přednáška

3.3 Kořeny polynomu

Nalezení

- lokalizace kořenů v \mathbb{C}
- aproximace kořenů

Věta 3.9. (Descartes) Počet kladných kořenů (včetně násobnosti) polynomu $p_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ je roven počtu znaménkových změn v posloupnosti a_0, a_1, \dots, a_n , nebo je o sudé číslo menší.

Věta 3.10. (Cauchy) Kořeny polynomu leží v kruhu

$$\Gamma = \left\{ z \in \mathbb{C}; |z| \leq 1 + \eta, \eta = \max_{0 \leq k \leq n-1} \left| \frac{a_k}{a_n} \right| \right\}$$

Poznámka 3.11 $1 \ll \eta$: translace a změna souřadnic

3.3.1 Hornerovo schema

V dalším budeme potřebovat vyčíslení hodnoty polynomu

$$p_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

v daném bodě x . Vyčíslení polynomu:

1. neefektivní

```

r = 1; s = a0;
for i = 1 to n do
  r = r · x;
  s = s + ai · r;
end for

```

$p_n(x) = s$, počet násobení $2n$.

2. Hornerovo schéma

```

s = an;
for i = n - 1 downto 0 do
  s = s · x + ai;
end for

```

$p_n(x) = s$, počet násobení n .

Poznámka 3.12 Zapišme Hornerovo schéma pro vyčíslení $p_n(z)$ takto:

```

bn = an;
for i = n - 1 downto 0 do
  bi = bi+1 · z + ai;
end for

```

$p_n(z) = b_0$.

Ukážeme, že tento zápis je vhodný pro vyčíslení derivace p'_n (a následně použijeme Newtonovu metodu pro určení kořene $p_n(x)$). Pro dělení polynomu polynomem platí

$$(a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_0) : (x - z) = \underbrace{a_n}_{b_n} x^{n-1} + \underbrace{(a_{n-1} + a_n z)}_{b_{n-1}} x^{n-2} + \dots + b_1 + \text{zbytek}$$

$$p_n(x) = q_{n-1}(x; z)(x - z) + b_0$$

$$\text{kde } q_{n-1}(x; z) = b_n x^{n-1} + b_{n-1} x^{n-2} + \dots + b_1$$

Je-li z kořen, pak $b_0 = 0$.

Nyní aplikujeme Newtonovu metodu pro nalezení kořene polynomu p_n .

$$\text{Newtonova metoda: } x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\overbrace{p_n(x^{(k)})}^{\text{Hornerovo sch.}}}{\underbrace{p'_n(x^{(k)})}_{\text{Hornerovo sch.}}}, \quad x^{(0)} \text{ dáno}$$

Vzorec, který dostaneme s využitím Hornerova schématu, se nazývá **Newtonova-Hornerova metoda**:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{p_n(x^{(k)})}{q_{n-1}(x^{(k)}; x^{(k)})}$$

Výraz ve jmenovateli dostaneme z následujících vztahů

$$p'_n(x) = q'_{n-1}(x; z)(x - z) + q_{n-1}(x; z),$$

$$p'_n(z) = q_{n-1}(z; z),$$
$$z := x^{(k)}.$$

Algoritmus pro nalezení kořenů polynomu p_n :

```
for  $m = n$  downto 1 do  
  Najdi kořen  $r$  polynomu  $p_m$  (Newtonova metoda)  
  Vyčísli koeficienty  $q_{m-1}(x; r)$  (pomocí Hornerova schematu)  
   $p_{m-1} := q_{m-1}$   
end for
```

Zkušební otázka 3.3 Odvoďte Newtonovu-Hornerovu metodu nalezení kořene polynomu.

Poznámka 3.13 Začít od kořene nejmenšího v absolutní hodnotě (kvůli zaokrouhlovacím chybám).

Poznámka 3.14 Restartovat algoritmus, t.j. použít původní polynom (je-li \tilde{r}_j aproximace kořene r_j , jít zpět k $p_n(x)$ a hledat novou aproximaci s $r_j^{(0)} = \tilde{r}_j$).

SOUSTAVY LINEÁRNÍCH ROVNIC

Hledáme $x \in \mathbb{R}^N$ takové, že

$$\mathbb{A}x = b, \quad \mathbb{A} \in \mathbb{R}^{N \times N}, \mathbb{A}\text{-nesingulární.}$$

Metody:

- **přímé** - konečný předem známý počet kroků pro nalezení řešení
- **iterační** - konstruujeme (nekonečnou) posloupnost vektorů konvergujících k řešení

4.1 Podmíněnost matic

Matice se nazývá **dobře podmíněná**, jestliže relativně malé změny v koeficientech způsobí relativně malé změny v řešení. Matice se nazývá **špatně podmíněná**, jestliže relativně malé změny v koeficientech způsobí relativně velké změny v řešení.

Analýza zaokrouhlovacích chyb - chyby ve výpočtu se obvykle reprezentují chybami ve vstupních datech. Vzhledem k zaokrouhlovacím chybám poskytuje numerická metoda přibližné řešení, které splňuje perturbovaný systém. Numerická metoda poskytuje (přesné) řešení $x + \delta x$ perturbovaného systému

$$(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b.$$

δx lze ("zhruba") odhadnout následujícím způsobem

$$\begin{aligned} x + \delta x &= (A + \delta A)^{-1}(b + \delta b) = [A(I + A^{-1}\delta A)]^{-1}(b + \delta b) \\ &= \underbrace{(I + A^{-1}\delta A)^{-1}}_{\text{nahradíme}} A^{-1}(b + \delta b) \\ &\approx \underbrace{(I - A^{-1}\delta A)}_{\text{motivace } \downarrow} (x + A^{-1}\delta b) = x + A^{-1}\delta b - A^{-1}\delta Ax - A^{-1}\delta AA^{-1}\delta b. \end{aligned}$$

$$f(x) = \frac{1}{1+x} = 1 + xf'(0) + \text{chyba} = 1 + x(-1) + \text{chyba} \quad \left(\frac{1}{1+x} \approx 1 - x \right).$$

$$\begin{aligned} \delta x &\doteq A^{-1}\delta b - A^{-1}\delta Ax, \\ \|\delta x\| &\leq \|A^{-1}\| \|\delta b\| + \|A^{-1}\| \|\delta A\| \|x\|, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} &\leq \frac{\|A^{-1}\| \|\delta b\|}{\|x\|} + \frac{\|A^{-1}\| \|\delta A\| \|A\|}{\|A\|} \\ &\leq \frac{\|A^{-1}\| \|A\| \|x\| \|\delta b\|}{\|x\| \|b\|} + \frac{\|A^{-1}\| \|\delta A\| \|A\|}{\|A\|} \end{aligned}$$

Závěr:

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \underbrace{\|A\| \|A^{-1}\|}_{\text{číslo podmíněnosti } K(A)} \left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|} + \frac{\|\delta A\|}{\|A\|} \right)$$

Poznámka 4.1 Nejčastěji používané normy v \mathbb{C}^N , $x \in \mathbb{C}^N$, $A \in \mathbb{C}^{N \times N}$

$$\|x\|_1 = \sum_i |x_i|,$$

$$\|x\|_2 = \sqrt{\left(\sum_i |x_i|^2 \right)} \quad \text{Euklidova,}$$

$$\|x\|_p = \left(\sum_i |x_i|^p \right)^{\frac{1}{p}} \quad 1 \leq p < \infty,$$

$$\|x\|_\infty = \max_i |x_i|,$$

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|},$$

$$\|A\|_1 = \max_j \sum_i |a_{ij}|, \quad \text{sloupcový součet}$$

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^H A)} = \sqrt{\rho(AA^H)},$$

A^H – transponovaná a kompl. združená (hermitovská),

$\rho(B)$ – největší v abs. hodnotě vlastní číslo B (spektrální poloměr),

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i,j} |a_{ij}|^2} \quad \text{Frobeniova,}$$

$$\|A\|_\infty = \max_i \sum_j |a_{ij}| \quad \text{řádkový součet,}$$

- $\|I\|_F = \sqrt{N}$
- $\|I\| = 1$, $\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$
- $\|AB\| \leq \|A\| \|B\|$ sub-multiplikativita

4.2 GauŤova eliminace

Cíl:

$$Ax = b \Leftrightarrow Ux = \hat{b}, \quad \text{kde } U \text{ je horní trojúhelníková}$$

Algoritmus 4.2

```

for sloupec  $j = 1$  to  $n - 1$  do
  najdi  $a_{pj} \neq 0$ ,  $p \in \{j, \dots, n\}$ 
  if  $a_{pj} = 0 \forall p$  then
    STOP (singularita)
  else
    záměna  $p$  a  $j$ -tého řádku
  end if
  for řádek  $i = j + 1$  to  $n$  do
     $l_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}$ ;
    for  $k = j + 1$  to  $n$  do
       $a_{ik} = a_{ik} - l_{ij}a_{jk}$ ;
    end for
     $b_i = b_i - l_{ij}b_j$ ;
  end for
end for

```

u_{ij} , $i \leq j$ jsou pak poslední hodnoty a_{ij}
 \hat{b}_i jsou pak poslední hodnoty b_i

Počet operací	v j -tém kroku	celkem
Hledání $a_{pj} \neq 0$	$n - j + 1$	$\sum_{j=2}^n j = \frac{(2+n)(n-1)}{2}$
Výpočet l_{ij}	$n - j$	$\sum_{j=1}^{n-1} j = \frac{n(n-1)}{2}$
Výpočet a_{ik}	$2(n - j)^2$	$2 \sum_{j=1}^{n-1} j^2 = 2 \frac{2n^3 - 3n^2 + n}{6}$
Výpočet b_i	$2(n - j)$	$2 \sum_{j=1}^{n-1} j = 2 \frac{n(n-1)}{2}$

Celkový počet operací: $\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$

Počet operací pro řešení $Ux = \hat{b}$: $\frac{\text{násobení}}{(n+1)n/2} \mid \frac{\text{sčítání}}{n(n-1)/2}$

Zkušební otázka 4.1 Zdůvodněte odhad počtu operací v Gaußově eliminaci.

4.2.1 Pivotace

Výpočet $l_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}$ v Algoritmu 4.2, $a_{jj} \neq 0$.

$$\text{Částečná pivotace} \quad |a_{pj}| = \max_{l=j, \dots, n} |a_{lj}| \quad (4.2.1)$$

$$\text{Úplná pivotace} \quad |a_{pj}| = \max_{l, m=j, \dots, n} |a_{lm}| \quad (4.2.2)$$

Důvod: I když Guaßova eliminace je proveditelná bez záměny řádků a sloupců, mohou malé hodnoty a_{jj} způsobit velké chyby v řešení.

Příklad 4.2

$$\begin{pmatrix} 6 & 1 & & & \\ 8 & 6 & 1 & & \\ & 8 & 6 & 1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & 8 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{50} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 7 \\ 15 \\ 15 \\ \vdots \\ 14 \end{pmatrix}, \quad x_{GE} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ \vdots \\ -3 \times 10^7 \end{pmatrix}$$

Gaušova eliminace je numericky nestabilní. Pivotace je podstatná pro stabilitu elim. procesu. Ani velké hodnoty pivotů však nejsou zárukou dostatečně přesného řešení.

Důvod: velké změny v koeficientech

Náprava: škálování, dělení i -tého řádku $d_i = \sum_{j=1}^n |a_{ij}|$, ale toto dělení opět vnáší zaokrouhlovací chyby.

4.3 Gaušova eliminace jako faktorizační metoda

$$Ax = b \Leftrightarrow LUx = b \quad \begin{cases} Ux = \hat{b}, \\ L\hat{b} = b. \end{cases} \quad (4.3.1)$$

Nechť P_j je matice, která v j -tém kroku Gaušovy eliminace realizuje záměnu p -tého a j -tého řádku matice A v Algoritmu 4.2

$$\begin{matrix} & & j & & p & & \\ & & & & & & \\ j & \begin{pmatrix} 1 & \cdot & & & \cdot & \\ \cdot & 0 & \cdot & \cdot & 1 & \cdot \\ & \cdot & 1 & & \cdot & \\ & \cdot & & 1 & \cdot & \\ p & \begin{pmatrix} \cdot & 1 & \cdot & \cdot & 0 & \cdot \\ \cdot & & & & \cdot & 1 \end{pmatrix} \end{pmatrix} & & & & & \\ & & & & & & \end{matrix} \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \circ & \circ & \circ & \circ & \circ & \circ \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \diamond & \diamond & \diamond & \diamond & \diamond & \diamond \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \diamond & \diamond & \diamond & \diamond & \diamond & \diamond \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \circ & \circ & \circ & \circ & \circ & \circ \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \end{pmatrix}$$

a necht' L_j je matice, pomocí níž se provádí nulování prvků j -tého sloupce pod diagonálou.

$$\begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -\ell_{43} & 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -\ell_{53} & \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & -\ell_{63} & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & \times \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times & \times \end{pmatrix}$$

Algoritmus Gaušovy eliminace lze maticově zapsat (GE s částeční pivotací):

$$\underbrace{L_{n-1}P_{n-1} \cdots L_1P_1}_M A = U.$$

Označme

$$P = P_{n-1} \cdots P_1,$$

$$M = L_{n-1}P_{n-1} \cdots L_1P_1.$$

Potom

$$\begin{aligned} MA &= U, \\ MP^{-1}PA &= U, \\ PA &= \underbrace{PM^{-1}}_L U, \\ PA &= LU. \end{aligned}$$

Lze-li provést Gaußovou eliminaci bez záměny řádků a sloupců, dostáváme

$$A = LU. \quad (4.3.2)$$

Věta 4.3 *Nechť $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, A regulární. Pak existuje permutační matice $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$, nesingulární U a L s jedničkami na diagonále ::*

$$PA = LU \quad (4.3.3)$$

Algoritmus

Matici L výše uvedenou dostaneme pomocí Algoritmu 4.2 tak, že l_{ij} uložíme do a_{ij} , jejichž hodnoty nejsou v Gaußově eliminaci potřeba a při pivotaci je zaměníme.

Řešení úlohy $Ax = b$ ve třech krocích

1. $PA = LU$
2. $PAx = L \underbrace{Ux}_{\hat{b}} = Pb$
- $L\hat{b} = Pb$
3. $Ux = \hat{b}$

7. přednáška

Měření kvality řešení: $r = b - A\tilde{x}$ - reziduum

Věta 4.4 (Odhad rezidua) [Prager/Oettli]

Nechť \tilde{x} je přibližné řešení $Ax = b$, $r = b - A\tilde{x}$ reziduum. Nechť je dáno $0 \leq \delta A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $0 \leq \delta b \in \mathbb{R}^n$. Pak \tilde{x} je přesné řešení

$$\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}, \quad \text{kde} \quad (4.3.4)$$

$$\left| \tilde{A} - A \right| \leq \delta A, \quad \left| \tilde{b} - b \right| \leq \delta b \quad (\text{po složkách}) \quad (4.3.5)$$

právě když

$$|r| \leq \delta A |\tilde{x}| + \delta b. \quad (4.3.6)$$

Důkaz (pouze \Rightarrow)

Nechť $\tilde{A}\tilde{x} = \tilde{b}$ (\tilde{x} je přesné řešení perturbovaného systému) a pro perturbace platí odhad

$$\begin{aligned} |\tilde{A} - A| &\leq \delta A \\ |\tilde{b} - b| &\leq \delta b \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{A} &= A + \Delta A & |\Delta A| &\leq \delta A \\ \tilde{b} &= b + \Delta b & |\Delta b| &\leq \delta b \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} |r| = |b - A\tilde{x}| &= \left| \tilde{b} - \Delta b - \underbrace{\tilde{A}\tilde{x}}_{\tilde{b}} + \Delta A\tilde{x} \right| \leq \\ &\leq |\Delta A\tilde{x} - \Delta b| \leq \delta A |\tilde{x}| + \delta b. \end{aligned}$$

□

4.4 LU rozklad v obecném případě

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} & \exists! \text{ LU rozklad} \\ A &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} & \text{neexistuje LU rozklad} \\ A &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} & \text{LU není jednoznačný} \end{aligned}$$

Při konstrukci LU rozkladu matice $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ postupujeme tak, že postupně počítáme m -tý řádek matice U a m -tý sloupec matice L , $m = 1, \dots, n$. Příslušné vzorce odvodíme pomocí vzorce pro násobení matic.

$$A = LU,$$

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{kj}.$$

Máme n^2 rovnic pro určení neznámých l_{ij} , $i \leq j$ a u_{ij} , $i \geq j$ (prvků dolní trojúhelníkové matice L a horní trojúhelníkové matice U). Počet neznámých je $2(1+n)n/2 = n^2 + n$. Předepíšeme tedy hodnoty některých prvků, například položíme diagonální prvky matice L rovny jedné. Dostáváme následující vzorce pro $m = 1, \dots, n$:

m -tý řádek matice U , u_{mj} , $j \geq m$ (křížky označují již spočtené hodnoty, počítáme prvek \diamond):

$$\underbrace{m \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \boxed{\times} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_A = \underbrace{m \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ \times & 1 & & & & \\ \times & \times & 1 & & & \\ \times & \times & \cdot & 1 & & \\ \times & \times & \cdot & \cdot & 1 & \\ \times & \times & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix}}_L \underbrace{\begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \cdot & \cdot & \diamond & \rightarrow & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_U$$

$$a_{mj} = \sum_{k=1}^n l_{mk} u_{kj} = \sum_{k=1}^{m-1} l_{mk} u_{kj} + 1 \cdot u_{mj}, \quad u_{mj} = \diamond,$$

m -tý sloupec matice L , l_{im} , $i > m$:

$$\underbrace{i \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_A = \underbrace{i \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \times & 1 & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \times & \times & 1 & \cdot & \cdot & \cdot \\ \times & \times & \circ & 1 & \cdot & \cdot \\ \times & \times & \downarrow & \cdot & 1 & \cdot \\ \times & \times & \cdot & \cdot & \cdot & 1 \end{pmatrix}}_L \underbrace{\begin{pmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ \cdot & \times & \times & \times & \times & \times \\ \cdot & \cdot & \diamond & \diamond & \diamond & \diamond \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}}_U$$

$$a_{im} = \sum_{k=1}^n l_{ik} u_{km} = \sum_{k=1}^{m-1} l_{ik} u_{km} + l_{im} \cdot u_{mm}, \quad l_{im} = \circ.$$

Zkušební otázka 4.2! Odvoďte vzorce pro konstrukci LU rozkladu matice A .

Věta 4.5 Necht' $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je obecná matice. Faktorizace $A = LU$ existuje a je jednoznačná právě když všechny hlavní minory A , t.j. $\det \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1k} \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{k1} & \cdots & a_{kk} \end{pmatrix}$, $k = 1, \dots, n-1$ jsou nenulové.

Věta 4.6 Je-li matice řádkově nebo sloupcově diagonálně dominantní, t.j.

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|, \quad (\text{řádkově}) \quad (4.4.1)$$

nebo

$$|a_{jj}| \geq \sum_{i=1, i \neq j}^n |a_{ij}|, \quad (\text{sloupcově}) \quad (4.4.2)$$

pak LU rozklad existuje. Speciálně, je-li matice sloupcově diagonálně dominantní, je $|l_{ij}| \leq 1 \forall i, j = 1, \dots, n$.

4.4.1 Vliv zaokrouhlovacích chyb

Uvažujeme-li zaokrouhlovací chyby, faktorizační proces produkuje matice \hat{L} , \hat{U} takové, že

$$\hat{L}\hat{U} = A + \delta A. \quad (4.4.3)$$

Lze odhadnout (viz (Higham, 1989))

$$|\delta A| \leq \frac{nu}{1 - nu} |\hat{L}| |\hat{U}|, \quad u = \frac{1}{2} \varepsilon_M, \quad (4.4.4)$$

kde $B = |A|$ znamená matici $n \times n$ s prvky $b_{ij} = |a_{ij}|$, $C \leq D$ má význam $c_{ij} \leq d_{ij}$ (po prvcích), $i, j = 1, \dots, n$ a ε_M je nejmenší číslo číslo takové, že $1 + \varepsilon_M > 1$ (strojové epsilon, roundoff unit). Z (4.4.4) je vidět ($l_{ij} = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}$, viz Gaußova eliminace), že přítomnost malých pivotů může způsobit neomezenost pravé strany a v důsledku toho ztrátu kontroly kontroly δA . Je tedy vhodné najít odhad

$$|\delta A| \leq \underbrace{g(u)}_{\text{vhodná funkce}} |A|$$

Příklad 4.7 Nechť $\hat{L} \geq 0$, $\hat{U} \geq 0$, pak $|\hat{L}| |\hat{U}| = |\hat{L}\hat{U}|$

$$|\hat{L}| |\hat{U}| = |\hat{L}\hat{U}| = |A + \delta A| \leq |A| + |\delta A| \leq |A| + \frac{nu}{1 - nu} |\hat{L}| |\hat{U}|$$

Odtud

$$\begin{aligned} |\hat{L}| |\hat{U}| \left(1 - \frac{nu}{1 - nu}\right) &\leq |A| \\ |\hat{L}| |\hat{U}| &\leq \left(\frac{1 - 2nu}{1 - nu}\right)^{-1} |A| \end{aligned}$$

a z 4.4.4 dostáváme

$$|\delta A| \leq \underbrace{\frac{nu}{1 - 2nu}}_{g(u)} |A| \quad (4.4.5)$$

Pivotace umožňuje obdržet odhad obdobný (4.4.5) pro libovolnou matici.

4.5 Choleského rozklad

Věta 4.8 Pro každou symetrickou, pozitivně definitní ($x^T A x > 0$, $\forall x \neq 0$, $x \in \mathbb{R}^n$) matici $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ existuje právě jedna dolní trojúhelníková matice L s kladnými prvky na diagonále tak, že platí

$$A = L \cdot L^T \quad (4.5.1)$$

Důkaz indukci □

Věta 4.9 Nechť $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je symetrická, ostře diag. dominantní ($|a_{ii}| > \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$), $a_{ii} > 0$, pak A je pozitivně definitní.

4.6 QR rozklad

Věta 4.10 *Ke každé nesingulární matici $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ existuje ortogonální matice $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ($QQ^T = Q^TQ = I$) a nesingulární horní trojúhelníková R taková, že*

$$A = Q \cdot R. \quad (4.6.1)$$

Poznámka 4.11 Transformace, která (na rozdíl od LU) nezvyšuje číslo podmíněnosti ($K(U) \leq 4^{n-1}K(PA)$).

ITERAČNÍ METODY ŘEŠENÍ SOUSTAV LINEÁRNÍCH ROVNIC

8. přednáška

$$A \in \mathbb{R}^{n \times n}, b \in \mathbb{R}^n, \det A \neq 0.$$

Hledáme $x \in \mathbb{R}^n$:

$$Ax = b. \tag{5.0.1}$$

Přímé metody (např. Gaußova eliminace) :

- pro libovolné plné matice
- počet operací $O(\frac{2}{3}n^3)$

Nevýhoda:

- a) nevyužívají informaci o struktuře matice (řídkost, blokově diagonální)
- b) nákladné, je-li n velké
- c) pro řídké matice mohou být nevhodné (zaplnění)

Iterační metody

- formálně poskytují řešení po nekonečném počtu kroků
- v každém kroku požadují výpočet rezidua, výpočetní náročnost $O(n^2)$
- mohou soupeřit s přímými metodami, je-li počet iterací k získání řešení s danou tolerancí nezávislý na n nebo menší než n
- používají se, stačí-li získat řešení pouze s určitou přesností (Fyzika \rightarrow model \rightarrow matematický model)

Idea iteračních metod: konstrukce $\{x^{(k)}\}$

$$x = \lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)}, \quad \text{kde } x \text{ je řešení } Ax=b. \tag{5.0.2}$$

Poznámka 5.1 Posloupnost $x^{(0)}, x^{(1)}, \dots, x^{(k)}, \dots$, je nekonečná, cílem je nalezení řešení x^* s předepsanou přesností, t.j. $\|x^* - x^{(k)}\| \leq \varepsilon$. Otázkou je určení vhodného stopping kriteria (např. omezenost rezidua $\|b - Ax^{(k)}\| \leq \varepsilon$).

Princip iteračních metod je na základě předchozích aproximací konstrukce nové aproximace

$$x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}), \quad \text{resp. } x^{(k+1)} = \varphi(x^{(k)}, x^{(k-1)}, \dots, x^{(0)})$$

takové, že

$$x^{(k+1)} \rightarrow x \text{ pro } k \rightarrow \infty,$$

kde x je hledané řešení. Požadavky:

- rychlá konvergence
- snadné vyčíslení φ (méně operací než matice \times vektor, řádově $O(n)$)
- řešení s předepsanou přesností

5.1 Klasické iterační metody

Idea: věta o pevném bodě

$$Ax = b \Leftrightarrow x = G(x). \quad (5.1.1)$$

Pro dané $x^{(0)}$ se řešení hledá jako limita posloupnosti $x^{(k+1)} = G(x^{(k)})$.

1. Richardsonova metoda

$$\begin{aligned} x &= x + b - Ax, \\ x &= \underbrace{(I - A)}_{B_R} x + b, \\ x^{(k+1)} &= B_R x^{(k)} + b. \end{aligned}$$

2. Jacobiho metoda

$$A = E + D + F, \quad \text{kde}$$

E je ostře dolní trojúhelníková,

D je diagonální,

F je ostře horní trojúhelníková.

$$\begin{aligned} Ax = b &\Leftrightarrow (E + D + F)x = b, \\ Dx &= -(E + F)x + b, \\ x &= \underbrace{-D^{-1}(E + F)}_{B_J} x + \underbrace{D^{-1}b}_{f_J}, \\ x^{(k+1)} &= B_J x^{(k)} + f_J. \end{aligned}$$

3. Gaußova–Seidelova metoda

$$\begin{aligned} Ax = b &\Leftrightarrow (D + E)x + Fx = b, \\ (D + E)x &= -Fx + b, \\ x &= \underbrace{-(D + E)^{-1}F}_{B_{GS}} x + \underbrace{(D + E)^{-1}b}_{f_{GS}}, \\ x^{(k+1)} &= B_{GS} x^{(k)} + f_{GS}. \end{aligned}$$

Poznámka 5.2 Porovnejme způsob algoritmizace Jacobiho a Gaußovy-Seidelovy metody. K tomu je třeba si nejprve uvědomit, že

$$D^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & & & & \\ & \frac{1}{a_{22}} & & & & \\ & & \frac{1}{a_{33}} & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & \frac{1}{a_{nn}} \end{pmatrix},$$

$$D^{-1}X = \begin{pmatrix} \frac{1}{a_{11}} \times & \frac{1}{a_{11}} \times & \frac{1}{a_{11}} \times & \frac{1}{a_{11}} \times & \frac{1}{a_{11}} \times & \frac{1}{a_{11}} \times \\ \frac{1}{a_{22}} \times & \frac{1}{a_{22}} \times & \frac{1}{a_{22}} \times & \frac{1}{a_{22}} \times & \frac{1}{a_{22}} \times & \frac{1}{a_{22}} \times \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{1}{a_{nn}} \times & \frac{1}{a_{nn}} \times & \frac{1}{a_{nn}} \times & \frac{1}{a_{nn}} \times & \frac{1}{a_{nn}} \times & \frac{1}{a_{nn}} \times \end{pmatrix}.$$

Vyčíslení inverzní matice v Gaußově-Seidelově metodě se vyhneme následujícím způsobem. Na základě vyjádření

$$x^{(k+1)} = \underbrace{-(D + E)^{-1}F}_{B_{GS}} x^{(k)} + \underbrace{(D + E)^{-1}b}_{f_{GS}}$$

přepíšeme Gaußovu-Seidelovu metodu ve tvaru

$$\begin{aligned} (D + E)x^{(k+1)} &= -Fx^{(k)} + b, \\ Dx^{(k+1)} &= -Ex^{(k+1)} - Fx^{(k)} + b, \\ x^{(k+1)} &= -D^{-1}Ex^{(k+1)} - D^{-1}Fx^{(k)} + D^{-1}b, \end{aligned}$$

$$x^{(k+1)} = -D^{-1}E x^{(k+1)} - D^{-1}F x^{(k)} + \underbrace{D^{-1}b}_{f_J}, \quad (5.1.2)$$

t.j.

$$\begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ \times \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \cdot & & & \\ \times & \cdot & & \\ \times & \times & \cdot & \\ \times & \times & \times & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{(k+1)} \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \cdot & \times & \times & \times \\ \cdot & \times & \times & \\ & \cdot & \times & \\ & & & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^{(k)} \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix}$$

$$+ \begin{matrix} f_J \\ \begin{pmatrix} \times \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix} \end{matrix}.$$

Při použití Jacobiho metody

$$x^{(k+1)} = B_J x^{(k)} + f_J,$$

t.j.

$$\begin{pmatrix} x^{k+1} \\ \times \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \cdot & \times & \times & \times \\ \times & \cdot & \times & \times \\ \times & \times & \cdot & \times \\ \times & \times & \times & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^k \\ \times \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_J \\ \times \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix},$$

je třeba si pamatovat celý vektor $x^{(k)}$ pro výpočet nové iterace $x^{(k+1)}$. U metody Gaußovy-Seidelovy se v paměti počítače rezervuje místo pro jediný vektor $x^{(k)}$, na jehož místo se postupně ukládají složky vektoru $x^{(k+1)}$ jak vyplývá z rozepsání po složkách vztahu (5.1.2):

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j &= b_i, \\ \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j + a_{ii} x_i + \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j &= b_i, \\ a_{ii} x_i &= - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j + b_i, \\ x_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{ii}} \left(- \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right) + \frac{b_i}{a_{ii}}. \end{aligned}$$

Dostáváme tak algoritmus **Gaußovy-Seidelovy metody**, který lze vyjádřit následujícím způsobem. Vyjdeme z Jacobiho metody a spočtenou složku $x_i^{(k+1)}$ uložíme do $x_i^{(k)}$ a následně počítáme $x_{i+1}^{(k+1)}$, $i = 1, \dots, n$.

$$i+1 \begin{pmatrix} x^{k+1} \\ \boxed{\times} \\ \boxed{\times} \\ \times \\ \times \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} \cdot & \times & \times & \times \\ \times & \cdot & \times & \times \\ \times & \times & \cdot & \times \\ \times & \times & \times & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x^k \\ \boxed{\times} \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} f_J \\ \times \\ \times \\ \times \\ \times \end{pmatrix}.$$

4. Metoda SOR (superrelaxační)

$$\begin{aligned} Ax &= (E + D + F)x = b, \\ \tilde{x}^{(k+1)} &= -D^{-1}Ex^{(k+1)} - D^{-1}Fx^{(k)} + D^{-1}b, \\ x^{(k+1)} &= x^{(k)} + \omega(\tilde{x}^{(k+1)} - x^{(k)}), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 x^{(k+1)} &= (1 - \omega)x^{(k)} + \omega\tilde{x}^{(k+1)}, \\
 x^{(k+1)} &= -\omega D^{-1}Ex^{(k+1)} + [(1 - \omega)I - \omega D^{-1}F]x^{(k)} + \omega D^{-1}b, \\
 x^{(k+1)} &= (D^{-1}ID + \omega D^{-1}E)^{-1} [(1 - \omega)D^{-1}ID - \omega D^{-1}F]x^{(k)} \\
 &\quad + (D^{-1}ID + \omega D^{-1}E)^{-1}\omega D^{-1}b, \\
 x^{(k+1)} &= \underbrace{(D + \omega E)^{-1}[(1 - \omega)D - \omega F]}_{B_{SOR}}x^{(k)} \\
 &\quad + \underbrace{(D + \omega E)^{-1}\omega b}_{f_{SOR}}. \\
 x^{(k+1)} &= B_{SOR}x^{(k)} + f_{SOR}.
 \end{aligned}$$

Pro výpočty pomocí výše uvedených metod se používá jejich zápis do složek:

$$\begin{aligned}
 x_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{ii}} \left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right) + \frac{b_i}{a_{ii}}, & \text{(Jacobi)} \\
 x_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{ii}} \left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right) + \frac{b_i}{a_{ii}}, & \text{(Gauß-Seidel)} \\
 \tilde{x}_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{ii}} \left(-\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij}x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j^{(k)} \right) + \frac{b_i}{a_{ii}}, & \text{(SOR)} \\
 x_i^{(k+1)} &= x_i^{(k)} + \omega(\tilde{x}_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}).
 \end{aligned}$$

Zkušební otázka 5.1! Odvoďte Jacobiho, Gaußovu–Seidelovu a SOR metodu pro řešení úlohy $Ax = b$. Zapište je maticově a rozepsané do složek bez použití inverze matic.

Uvažujme iterační metodu

$$x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f. \quad (5.1.3)$$

Definice 5.3 Řekneme, že iterační metoda $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ je konzistentní s $Ax = b$, jestliže

$$x = Bx + f, \text{ kde } x \text{ je řešení úlohy } Ax = b.$$

Ekvivalentně

$$f = (I - B)x = (I - B)A^{-1}b.$$

Věta 5.4 *Nechť $x^{(k+1)} = Bx^{(k)} + f$ je konzistentní metoda. Pak posloupnost $\{x^{(k)}\}$ konverguje k x^* , kde x^* splňuje $Ax^* = b$, pro libovolné $x^{(0)}$, právě když $\rho(B)$ (spektrální poloměr matice B , $\rho(B) = \max_{\lambda \text{ vl. č. } B} |\lambda|$) je menší než 1.*

Důkaz

$$\begin{aligned} x^* &= Bx^* + f \quad (\text{podmínka konzistence}), \\ x^{(k+1)} &= Bx^{(k)} + f \quad (\text{iterační metoda}), \\ e^{(k+1)} &:= x^* - x^{(k+1)} \quad (\text{chyba v } (k+1)\text{-ní iteraci}). \end{aligned}$$

Chybu v k -té iteraci lze vyjádřit jako součin k -té mocniny matice B a chyby počáteční aproximace

$$e^{(k)} = Be^{(k-1)} = B^2e^{(k-2)} = \dots = B^k e^{(0)}.$$

Podle definice limity

$$x^{(k)} \rightarrow x^* \Leftrightarrow \|e^{(k)}\| \rightarrow 0.$$

Platí

$$\|e^{(k)}\| \rightarrow 0 \Leftrightarrow \|B^k e^{(0)}\| \rightarrow 0 \Leftrightarrow \rho(B) < 1.$$

Poslední ekvivalenci dokážeme na základě následující věty z algebry. Vyhneme se tak klasickému důkazu pomocí převedení matice B na **Jordanův** kanonický tvar.

Lemma 5.5 *Nechť $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $\varepsilon > 0$. Pak existuje konzistentní ($\|Ax\| \leq \|A\| \|x\|$) maticová norma $\|\cdot\|_{A,\varepsilon}$ taková, že*

$$\|A\|_{A,\varepsilon} \leq \rho(A) + \varepsilon.$$

Pokračování v důkazu předchozí věty

⇐ Nechť $\rho(B) < 1$. Potom $\exists \varepsilon :: \rho(B) < 1 - \varepsilon$ a dále existuje $\|\cdot\|_{B,\varepsilon} ::$

$$\|B\|_{B,\varepsilon} \leq \rho(B) + \varepsilon < 1$$

a tedy

$$\|B^k\|_{B,\varepsilon} \leq \|B\|_{B,\varepsilon}^k \rightarrow 0.$$

Platí tedy

$$\|e^{(k)}\| = \|B^k e^{(0)}\| \leq \|B^k\| \|e^{(0)}\| \leq \|B\|_{B,\varepsilon}^k \|e^{(0)}\| \rightarrow 0.$$

⇒ Předpokládejme sporem, že $\rho(B) > 1$. Existuje tedy vlastní číslo λ matice B takové, že $|\lambda| > 1$. Zvolme počáteční aproximaci $x^{(0)}$ tak, že $e^{(0)}$ je vlastní vektor odpovídající vlastnímu číslu λ . Potom

$$e^{(k)} = B^k e^{(0)} = \lambda^k e^{(0)}.$$

V důsledku tohoto vztahu $e^{(k)}$ **nekonverguje k nule** (pro danou volbu $x^{(0)}$), protože $|\lambda| > 1$.

□

Poznámka 5.6 Lemma 5.5 jsme využili pro důkaz vztahu $\rho(B) < 1 \Rightarrow B^k \rightarrow 0$. Obrácená implikace se dokáže snadno.

Pro důkaz konvergence výše uvedených klasických iteračních metod se využívá řada kritérií, která vycházejí z přímo z vlastností matice A . Detaily viz cvičení k přednášce.

VÝPOČET VLASTNÍCH ČÍSEL MATIC

9. přednáška

$$A \in \mathbb{C}^{n \times n}.$$

Hledáme $\lambda \in \mathbb{C} :: \exists x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0$,

$$Ax = \lambda x. \quad (6.0.1)$$

- aplikace: kvantová mechanika, strukturální vibrace, analýza elektrických sítí, analýza numerických metod (výpočet optimálních parametrů relaxačních metod), analýza stability numerických metod pro řešení soustav obyčejných diferenciálních rovnic
- omezíme se na výpočet dominantního vlastního čísla

6.1 Mocinná metoda

$A \in \mathbb{C}^{n \times n}$, A diagonalizovatelná

$$A = X \Lambda X^{-1}, \quad X = \begin{pmatrix} \vdots & & \vdots \\ x_1 & \cdots & x_n \\ \vdots & & \vdots \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{n \times n},$$

x_i vlastní vektory ($Ax_i = \lambda_i x_i$), $\|x_i\| = 1$. Nechť $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$, λ_1 má násobnost 1. Pak λ_1 nazveme dominantním vlastním číslem.

Nechť je dáno $q^{(0)} \in \mathbb{C}^n$, $\|q^{(0)}\| = 1$ ($\|\cdot\| := \|\cdot\|_2$ - Euklidovská). Konstruueme posloupnost vektorů

$$q^{(k)} = \frac{Aq^{(k-1)}}{\|Aq^{(k-1)}\|} = \cdots = \frac{A^k q^{(0)}}{\|A^k q^{(0)}\|} \quad (\text{odtud název mocinná metoda}).$$

Je-li A diagonalizovatelná, má matice X za sloupce vlastní vektory matice A . Tyto vlastní vektory jsou lineárně nezávislé a tvoří bázi \mathbb{C}^n . Lze tedy psát:

$$q^{(0)} = \sum_{i=1}^n \alpha_i x_i, \quad \alpha_i \in \mathbb{C}, \quad i = 1, \dots, n.$$

Budeme uvažovat takové $q^{(0)}$, pro které $\alpha_1 \neq 0$. Jinak bychom v dalším postupu narazili na problém dělení nulou. Dále $Ax_i = \lambda_i x_i$ pro $i = 1, \dots, n$ a vytkneme-li $\alpha_1 \lambda_1^k$, dostaneme

$$q^{(k)} = \frac{\sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k x_i}{\left\| \sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k x_i \right\|} = \frac{\alpha_1 \lambda_1^k (x_1 + y^{(k)})}{|\alpha_1 \lambda_1^k| \|x_1 + y^{(k)}\|}$$

kde $(\sum_{i=1}^n \alpha_i \lambda_i^k x_i = \alpha_1 \lambda_1^k (x_1 + \frac{\alpha_2 \lambda_2}{\alpha_1 \lambda_1^k} x_2 + \dots + \frac{\alpha_n \lambda_n}{\alpha_1 \lambda_1^k} x_n))$

$$y^{(k)} = \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x_i$$

a v důsledku předpokladu, že λ_1 je dominantní vlastní číslo matice A a $\|x_i\| = 1$,

$$\|y^{(k)}\| = \left\| \sum_{i=2}^n \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1} \right)^k x_i \right\| \leq \underbrace{\sum_{i=2}^n \left| \frac{\alpha_i}{\alpha_1} \right|}_{C} \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k \leq C \left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|^k.$$

Odtud dostáváme

$$y^{(k)} \rightarrow 0 \quad \text{pro } k \rightarrow \infty.$$

Pro $k \rightarrow \infty$ se tedy směr $q^{(k)}$ bude blížit směru x_1 . O rychlosti konvergence rozhoduje podíl $|\lambda_2/\lambda_1|$.

Uvažujme $Aq^{(k)}$ a $q^{(k)H} Aq^{(k)}$ ($x^H = \bar{x}^T$). Ukážeme, že

$$q^{(k)H} Aq^{(k)} \rightarrow \lambda_1 \quad \text{pro } k \rightarrow \infty.$$

$$\begin{aligned} q^{(k)H} &= \frac{\alpha_1 \lambda_1^k (x_1 + y^{(k)})^H}{|\alpha_1 \lambda_1^k| \|x_1 + y^{(k)}\|}, & Aq^{(k)} &= \frac{\alpha_1 \lambda_1^k (\lambda_1 x_1 + Ay^{(k)})}{|\alpha_1 \lambda_1^k| \|x_1 + y^{(k)}\|}, \\ q^{(k)H} Aq^{(k)} &= \frac{(\alpha_1 \lambda_1^k)^2 (\lambda_1 + x_1^H Ay^{(k)} + \lambda_1 y^{(k)H} x_1 + y^{(k)H} Ay^{(k)})}{|\alpha_1 \lambda_1^k|^2 \|x_1 + y^{(k)}\|^2} \rightarrow \lambda_1, \end{aligned}$$

kde jsme využili toho, že $x_1^H x_1 = 1$.

Zkušební otázka 6.1! Dokažte konvergenci mocninné metody pro výpočet dominantního vlastního čísla matice A .

Dále ukážeme, že $q^{(k)} \rightarrow x_1$. K tomu uvažujme

$$\begin{aligned} Aq^{(k)} - \lambda_1 q^{(k)} &= \frac{\alpha_1 \lambda_1^k (\lambda_1 x_1 + Ay^{(k)})}{|\alpha_1 \lambda_1^k| \|x_1 + y^{(k)}\|} - \frac{\alpha_1 \lambda_1^k (\lambda_1 x_1 + \lambda_1 y^{(k)})}{|\alpha_1 \lambda_1^k| \|x_1 + y^{(k)}\|} \\ &= \frac{\alpha_1 \lambda_1^k (Ay^{(k)} - \lambda_1 y^{(k)})}{|\alpha_1 \lambda_1^k| \|x_1 + y^{(k)}\|} \rightarrow 0 \end{aligned}$$

v důsledku toho, že $y^{(k)} \rightarrow 0$ pro $k \rightarrow \infty$.

NUMERICKÁ INTEGRACE OBYČEJNÝCH DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC

7.1 Formulace problému

10. přednáška

Dáno $f : [a, b] \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f = f(x, y)$, $x \in [a, b]$, $y \in \mathbb{R}$. Dána tzv. počáteční podmínka $\eta \in \mathbb{R}$. Hledáme zobrazení $y : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ splňující

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)), & x \in [a, b], \\ y(a) &= \eta. \end{aligned}$$

Vyšetřování:

- (lokální) existence a jednoznačnost - matematická analýza: o funkci f předpokládáme, že je spojitá a dále předpokládáme, že f je (lokálně) lipschitzovská v druhé proměnné
- nalezení řešení
 - * analyticky
 - * numericky

7.2 Jednokrokové metody

Uvažujme dělení intervalu $[a, b]$ s uzly $x_i = a + ih$, $i = 0, \dots, n$ (s konstantním krokem, obecně lze uvažovat nekonstantní).

Hodnotu řešení $y(x_i)$ aproximujeme pomocí hodnoty y_i :

$$y(x_i) \approx y_i, \quad i = 0, \dots, n.$$

V uzlu x_i platí

$$y'(x_i) = f(x_i, y(x_i)).$$

Předpokládejme, že funkce y je dostatečně hladká. Z Taylorova rozvoje dostaneme

$$y'(x_i) = \frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + O(h).$$

Dosadíme-li tento vztah do diferenciální rovnice, dostaneme

$$\frac{y(x_{i+1}) - y(x_i)}{h} + O(h) = f(x_i, y(x_i)).$$

To nás vede k myšlence, zanedbat chybu řádu $O(h)$ a počítat přibližné hodnoty y_i , $i = 1, \dots, n$ ze vztahu

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} = f(x_i, y_i)$$

tak, že přibližnou hodnotu funkce y v uzlu x_{i+1} vyjádříme pomocí přibližné hodnoty v uzlu x_i :

$$y_{i+1} = y_i + h f(x_i, y_i), \quad y_0 = \eta \text{ (dáno)}.$$

Tato metoda se nazývá **Eulerova metoda** pro řešení úlohy $y' = f(x, y)$ s danou počáteční podmínkou.

Zkušební otázka 7.1 Odvoďte Eulerovu metodu pro řešení úlohy $y' = f(x, y)$.

Obecně uvažujme metody typu:

$$y_{i+1} = y_i + h \underbrace{\phi(x_i, y_i, h)}_{\text{přírůstkové zobrazení}}. \quad (7.2.1)$$

Tato metoda se nazývá **jednokroková**, protože hodnotu aproximace y_{i+1} počítáme pomocí hodnoty y_i . Pro Eulerovu metodu máme

$$\phi(x_i, y_i, h) := f(x_i, y_i).$$

Při použití Eulerovy metody dále platí pro hodnoty přesného řešení

$$\underbrace{\frac{y(x+h) - y(x)}{h}}_{\text{přesný relativní přírůstek}} = y'(x) + O(h) = f(x, y(x)) + O(h) = \phi(x, y(x), h) + O(h).$$

přesný relativní přírůstek

V Eulerově metodě se tedy liší přesný relativní přírůstek a přírůstkové zobrazení o veličinu řádu $O(h)$:

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} = \phi(x, y(x), h) + O(h).$$

To nás vede k definici řádu metody:

Definice 7.1 Řekneme, že metoda (7.2.1) je řádu p , jestliže

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} = \phi(x, y(x), h) + O(h^p). \quad (7.2.2)$$

Jinými slovy definice říká, že obecná jednokroková metoda (7.2.1) je řádu p , jestliže přesné řešení splňuje vztah (7.2.1) s chybou $hO(h^p)$.

Definice 7.2 Řekneme, že obecná jednokroková metoda je **konvergentní**, jestliže

$$\forall i = 0, \dots, n, \quad |y(x_i) - y_i| \leq \varphi(h),$$

kde $\varphi(h)$ je *infinitesimální* vzhledem k h . V takovém případě řekneme, že metoda je **konvergentní s řádem p** , jestliže $\varphi(h) = O(h^p)$.

Věta 7.3 Metoda (7.2.1) je konvergentní, právě když $f(x, y) = \phi(x, y, 0)$, za předpokladu spojitosti f, ϕ a **lipschitzovskosti** f a ϕ v druhé proměnné.

Věta 7.4 (Odhad chyby) Je-li metoda řádu p , potom \exists konstanta $C \geq 0$ taková, že

$$|y(x_i) - y_i| \leq C \cdot h^p \cdot \frac{e^{L(x_i - x_0)} - 1}{L},$$

za předpokladu spojitosti f, ϕ a **lipschitzovskosti** f a ϕ v druhé proměnné. Zde L je konstanta lipschitzovskosti přírůstkového zobrazení ϕ .

Poznámka 7.5 Obdobně se odvodí jednokrokové metody pro řešení soustav obyčejných diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} y'(x) &= f(x, y(x)), \quad x \in [a, b], \\ y(a) &= \eta, \end{aligned}$$

$$f : [a, b] \times \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}^m, \eta \in \mathbb{R}^m.$$

7.2.1 Metody typu Runge–Kutta

Podobně jako při konstrukci Eulerovy metody, která je metodou prvního řádu, můžeme postupovat při odvození metody vyššího řádu. Z Taylorova rozvoje funkce y dostaneme

$$\begin{aligned} y(x_{i+1}) &= y(x_i) + h y'(x_i) + \frac{1}{2} h^2 y''(x_i) + O(h^3), \\ y(x_{i+1}) &= y(x_i) + h f(x_i, y(x_i)) + \frac{1}{2} h^2 \frac{df}{dx}(x_i, y(x_i)) + O(h^3). \end{aligned}$$

Podle věty o derivaci složené funkce máme

$$\frac{df}{dx} = f_x + f_y f.$$

Můžeme tak zkonstruovat metodu druhého řádu s přírůstkovým zobrazením

$$\phi(x, y, h) = f(x, y) + \frac{1}{2} h \left(f_x(x, y) + f_y(x, y) f(x, y) \right),$$

kteří ale závisí na derivacích zobrazení f . Proto se používají metody typu **Runge–Kutta**: konstruuje se ϕ , splňující (7.2.2), bez použití derivací f . Základní myšlenka spočívá v tom, že přírůstkové zobrazení se hledá ve speciálním tvaru tak, aby se lišilo od přesného relativního přírůstku o veličinu $O(h^p)$. Tvar, ve kterém se hledá přírůstkové zobrazení, je následující:

$$\phi(x, y, h) = \sum_{i=1}^s \omega_i k_i = \omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 + \cdots + \omega_s k_s,$$

kde ω_i jsou konstanty. Veličiny k_i jsou vyjádřeny pomocí hodnot zobrazení f bez použití jeho derivací.

$$k_1 = f(x, y),$$

$$\begin{aligned}
 k_2 &= f(x + \alpha_2 h, y + \beta_{21} h k_1), \\
 &\vdots \\
 k_i &= f(x + \alpha_i h, y + h \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{ij} k_j), \\
 &\vdots \\
 k_s &= f(x + \alpha_s h, y + h \sum_{j=1}^{s-1} \beta_{sj} k_j),
 \end{aligned}$$

kde α_i, β_{ij} jsou konstanty. Ve výše uvedených vzorcích je obecně

$$s \neq p.$$

Pro požadovaný řád metody $p \leq 4$ lze volit $s := p$. Pro $p > 4$ musí být $s > p$.

7.2.1.1 Rungeova–Kuttova metoda 2. řádu Ukážeme, jak se určí konstanty $\omega_i, \alpha_i, \beta_{ij}$ na příkladu odvození Rungeovy-Kuttovy metody 2. řádu, tj. pro $p = 2$. Přírůstkové zobrazení hledáme ve tvaru

$$\phi(x, y, h) = \omega_1 f(x, y) + \omega_2 f(x + \alpha h, y + \beta h f(x, y)).$$

Cílem je určit konstanty $\omega_1, \omega_2, \alpha, \beta$ tak, aby metoda byla 2. řádu, tj. aby

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} = \phi(x, y, h) + O(h^2).$$

Myšlenka je založena na vyjádření přesného relativního přírůstku pomocí Taylorova rozvoje ve tvaru

$$\frac{y(x+h) + y(x)}{h} = \text{výraz 1} + O(h^2)$$

a vyjádření přírůstkového zobrazení ϕ ve tvaru

$$\phi(x, y, h) = \text{výraz 2} + O(h^2).$$

Konstanty $\omega_1, \omega_2, \alpha, \beta$ ve ‘výraz 2’ nastavíme tak, aby ‘výraz 1’ = ‘výraz 2’. Z Taylorova rozvoje funkce y dostaneme

$$y(x+h) = y(x) + hf + \frac{1}{2}h^2 \left(\underbrace{f_x + f_y f}_{y''(x) = \frac{d}{dx} f(x, y(x)) = f_x + f_y f} \right) + O(h^3),$$

odkud

$$\frac{y(x+h) - y(x)}{h} = \underbrace{f + \frac{1}{2}hf_x + \frac{1}{2}hf_y f}_{\text{výraz 1}} + O(h^2).$$

Na základě Taylorova rozvoje funkce dvou proměnných f

$$f(x + h_1, y + h_2) = f(x, y) + h_1 \frac{\partial f}{\partial x}(x, y) + h_2 \frac{\partial f}{\partial y}(x, y) + O(|h|^2)$$

pro $h_1 = \alpha h, h_2 = \beta h$ a definice přírůstkového zobrazení v metodě typu Runge–Kutta

$$\phi(x, y, h) = \omega_1 f(x, y) + \omega_2 f(x + \alpha h, y + \beta h f(x, y))$$

vyjádříme přírůstkové zobrazení ve tvaru

$$\phi(x, y, h) = \underbrace{\omega_1 f + \omega_2 [f + \alpha h f_x + \beta h f f_y]}_{\text{výraz 2}} + O(h^2).$$

‘výraz 2’ ještě upravíme, abychom ho mohli porovnat s ‘výrazem 1’:

$$\phi(x, y, h) = \underbrace{(\omega_1 + \omega_2) f + \omega_2 \alpha h f_x + \omega_2 \beta h f f_y}_{\text{výraz 2}} + O(h^2).$$

Porovnáním koeficientů u f , $h f_x$ a $h f f_y$ ve ‘výraz 1’ a ‘výraz 2’ získáme rovnice pro $\omega_1, \omega_2, \alpha$ a β

$$1 = \omega_1 + \omega_2, \quad \frac{1}{2} = \alpha \omega_2, \quad \frac{1}{2} = \beta \omega_2.$$

Odvodili jsme tak 3 rovnice pro 4 neznámé. Zvolíme např. $\omega_1 = 0$ a určíme zbývající konstanty:

$$\begin{aligned} \omega_2 &= 1, \\ \alpha &= \frac{1}{2}, \quad \beta = \frac{1}{2}. \end{aligned}$$

Runge–Kuttovu metodu 2. řádu lze tedy zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} y_{i+1} &= y_i + h \phi(x_i, y_i, h), \\ \phi(x_i, y_i, h) &= f\left(x_i + \frac{1}{2}h, y_i + \frac{1}{2}h f(x_i, y_i)\right). \end{aligned}$$

Zkušební otázka 7.2! Odvoďte Rungeovu–Kuttovu metodu 2. řádu.

GRADIENTNÍ METODY

8.1 Formulace problému

11. přednáška<http://www.karlin.mff.cuni.cz/~felcman/Rem-CG.pdf>12. přednáškahttp://www.karlin.mff.cuni.cz/~felcman/Steepest_descent.pdf

BIBLIOGRAFIE

- Feistauer, M., Felcman, J., and Straškraba, I. (2003). *Mathematical and Computational Methods for Compressible Flow*. Oxford University Press, Oxford.
- Higham, N. (1989). The accuracy of solutions to triangular systems. *SIAM J. Appl. Math.*, **26**(5), 1252–1265.
- Quarteroni, A., Sacco, R., and Saleri, F. (2004). *Numerical Mathematics* (2nd edn), Volume 37 of *Texts in Applied Mathematics*. Springer, Berlin. ISBN 0-387-98959-5.
- Segethová, J. (2000). *Základy numerické matematiky*. Karolinum, Praha.
- Ueberhuber, W. (2000). *Numerical Computation 1, 2: Methods, Software, and Analysis*. Springer, Berlin.

INDEX

- bod
 - nulový, 6
- chyba Lagrangeovy interpolace, 5, 6
- dělení intervalu, 2
- formule
 - kvadrurní, 12
- koeficienty kvadrurní formule, 12
- polynom
 - Lagrangeův, 5
 - Lagrangeův interpolační, 4
- pravidlo
 - lichoběžníkové, 13
 - Simpsonovo, 13
- sít, 2
- spline
 - k -tého řádu, 6
 - kubický, 6, 7
 - přirozený kubický, 7
 - stupeň volnosti, 7
- uzly
 - kvadrurní formule, 12
 - sítě, 2
- věta
 - Rolleova, 6
- zbytek kvadrurního vzorce, 14