

Metody numeryczne

Janusz Miller

Katedra Informatyki Stosowanej
AGH University of Science and Technology

19.10.2021

- ① Kincaid D., Cheney W.: Analiza numeryczna, WNT 2006
- ② Dudek-Dyduch E., Wąs j., Dutkiewicz L., Grobler-Dębska K. Gudowski B.: Metody numeryczne - Wybrane zagadnienia, Wydawnictwa AGH Kraków 2011
- ③ Wybrane zagadnienia numeryczne - analiza i dobór algorytmów, pod red. J.Wąsa Wydawnictwa AGH Kraków - w druku.
- ④ Strang G.: Differential Equations and Linear Algebra, Wellesley - Cambridge Press 2009
- ⑤ Nocedal J., Wright S.J.: Numerical Optimization, Springer 1999 (lub późniejsze, np. 2006)
- ⑥ Burden R., Faires J., Numrical Analysis, Prindle, Weber & Schmidt - Kent, Boston 1985

Część III

Numeryczna algebra liniowa

1 Podstawowe pojęcia

2 Niesobliwe układy równań

- Uwarunkowanie układu równań
- Algorytmy bezpośrednie
- Algorytmy iteracyjne

3 Zagadnienie własne

- Numeryczne metody wyznaczania wartości i wektorów własnych macierzy

Norma wektora



Wektor

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n.$$

Ogólnie: p -ta norma Höldera:

$$\|\mathbf{x}\|_p = \sqrt[p]{\sum_{i=1}^n |x_i|^p}, \quad 1 \leq p \leq \infty.$$

Najczęściej stosowane normy wektora :

- $\|\mathbf{x}\|_1 = \sum_{i=1}^n |x_i|$ norma-1,
- $\|\mathbf{x}\|_2 = \sqrt{\sum_{i=1}^n x_i^2}$ norma euklidesowa,
- $\|\mathbf{x}\|_\infty = \max_{i=1 \dots n} |x_i|$ norma- ∞ , norma-maksimum.

Norma macierzy indukowana przez normę p wektora



Macierz $A \in \mathbb{R}^{m,n}$, wektor $x \in \mathbb{R}^n$, $\|x\|_p \leq 1$.

Norma macierzy (ogólnie):

$$\|A\|_p = \max_x \left\{ \frac{\|Ax\|_p}{\|x\|_p} \right\}.$$

Własności:

$$\|Ax\| \leq \|A\| \cdot \|x\|$$

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|$$

Normy często stosowane



Dla $p = 1$ – „długość największej kolumny”:

$$\|A\|_1 = \max_{j=1,\dots,n} \sum_{i=1}^m |a_{i,j}|.$$

Dla $p = \infty$ – „długość największego wiersza”:

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\dots,m} \sum_{j=1}^n |a_{i,j}|.$$

Norma macierzy indukowana przez normę euklidesową wektora



Norma spektralna macierzy:

$$\|A\|_2 = \sqrt{\max\{\sigma(A^T A)\}}$$

- $A^T A$ jest macierzą symetryczną, dodatnio półokreśloną. Jej wartości własne są rzeczywiste, nieujemne.
- σ – widmo macierzy (zbiór wartości własnych).

Problem numeryczny:
Rozwiązać układ równań liniowych,

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{n,n}, \quad b, x \in \mathbb{R}^n, \quad \det(A) \neq 0.$$

Uwagi:

- 1 O układach osobliwych – na wykładzie o aproksymacji.
- 2 Stosowanie wzorów Cramera możliwe tylko dla małych n . Dla np. $n = 14$ konieczne jest wykonanie $\approx 1.7 \cdot 10^{13}$ mnożeń i tyle samo dodawań.

Wskaźnik uwarunkowania



AGH

Jeżeli wektor prawej strony równania jest zaburzony $b^* = b + \delta b$, to rozwiązanie też będzie zaburzone $x^* = x + \delta x$.

Wskaźnik uwarunkowania macierzy A określa wrażliwość rozwiązania układu równań liniowych o danej macierzy A na zaburzenie prawej strony równania.

Z definicji:

$$\text{cond}(A) : \frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}.$$

Wskaźnik uwarunkowania c.d.



Tw.:

$$\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|.$$

Dla normy euklidesowej:

$$\text{cond}(A) = \sqrt{\frac{\max\{\sigma(A^T A)\}}{\min\{\sigma(A^T A)\}}}$$

Uwaga:

Jaka jest najmniejsza wartość wskaźnika uwarunkowania macierzy? Jaki wniosek dotyczący przenoszenia błędu?

Oszacowanie błędu rozwiązania

Poprawa uwarunkowania przez skalowanie



- Dla dobrego¹ oszacowania błędu rozwiązania, należy przeprowadzić skalowanie macierzy.
- Skalowanie (wierszami) to przejście od oryginalnego układu $Ax = b$ do równoważnego mu $\hat{A}x = \hat{b}$, gdzie $\hat{A} = DA$, $\hat{b} = Db$ za pomocą macierzy diagonalnej $D = \text{diag}(d_i)$, $d_i > 0$.
- Spośród wszystkich macierzy powstających z A przez skalowanie wierszami, **macierz wyważona wierszami** ma najmniejszy wskaźnik uwarunkowania w normie $\| \cdot \|_{\infty}$.
- **Wektor wyważony** to wektor o takich samych modułach elementów.
- **Macierz wyważona wierszami** – gdy sumy modułów elementów we wszystkich wierszach są sobie równe.

¹tzn. pozbawionego dużego nadmiaru

Przegląd algorytmów bezpośrednich („dokładnych”)



AGH

- Układy równań z macierzą trójkątną lub ortogonalną.
- Podstawowy algorytm Gaussa – z etapami eliminacji i podstawiania wstecz.
- Algorytm operacji na macierzach prowadzący do rozkładu $PA = LU$ (iloczyn macierzy trójkątnych) lub $PA = QR$ (iloczyn macierzy ortogonalnej i trójkątnej).
- Modyfikacje algorytmu Gaussa
 - 3 strategie wyboru elementu głównego,
 - algorytmy dla macierzy symetrycznych, np. rozkład Choleskiego $A = LL^T$,
 - algorytmy dla macierzy pasmowych (taśmowych), rozrzedzonych.

Ogólny algorytm rozwiązywania problemu liniowego



Kompletny algorytm rozwiązywania problemu liniowego:

- ① sprawdzenie wskaźnika uwarunkowania,
- ② rozwiązanie za pomocą algorytmu dobrane do typu macierzy A ,
- ③ iteracyjne poprawianie rozwiązania:
 - $r^{(k)} = Ax^{(k)} - b$,
 - oblicz $h^{(k)}$ z równania $Ah^{(k)} = r^{(k)}$,
 - $x^{(k+1)} = x^{(k)} - h^{(k)}$.

Algorytmy bezpośrednie a iteracyjne



Na wybór między algorytmami bezpośrednimi a iteracyjnymi ma wpływ m.in.:

- Czy ma znaczenie czas obliczeń (czas obliczeń metodami bezpośrednimi łatwo można oszacować, ale te metody nie dają żadnego przybliżenia rozwiązania przed końcem obliczeń).
- Rozmiar problemu n ,
- Spełnienie warunków zbieżności metod iteracyjnych,
- Rodzaj macierzy: rzadka czy gęsta.

Zapis algorytmu iteracyjnego



Równanie $Ax = b$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases}$$

jest rozwiązywane metodą punktu stałego (iteracji prostej).

Założenie $a_{ii} \neq 0$, $i = 1, \dots, n$.

Funkcja iteracji:

$$x^{(k+1)} = Tx^{(k)} + c. \quad (1)$$

Warunek zbieżności



Jeżeli od (1) odejmiemy stronami równanie zapisane dla punktu stałego $\bar{x} = T\bar{x} + c$, to

$$x^{(k+1)} - \bar{x} = T(x^{(k)} - \bar{x}),$$

zatem

$$x^{(k+1)} - \bar{x} = T^k(x^{(0)} - \bar{x}).$$

Dwa ważne wnioski:

- 1 Dla zbieżności wystarczy, aby (dowolna) norma z macierzy $\|T\|_p < 1$.
- 2 Zbieżność nie zależy od wyboru punktu startowego.

Podstawowe metody iteracyjne



Ogólny algorytm:

Macierz współczynników przedstawiamy w postaci sumy macierzy trójkątnej dolnej, diagonalnej i trójkątnej górnej:

$$A = L + D + U.$$

Uwaga:

Podział macierzy na 3 składniki nie wymaga żadnych obliczeń – w przeciwieństwie do **rozkładu** macierzy do postaci iloczynowej, np. LU , QR .

Metoda Jacobiego



Konstrukcja funkcji iteracji:

$$Dx^{(k+1)} = -(L + U)x^{(k)} + b$$

$$x^{(k+1)} = -D^{-1}(L + U)x^{(k)} + D^{-1}b$$

Układ równań:

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = (-a_{12}x_2^{(k)} - a_{13}x_3^{(k)} - \dots - a_{1n}x_n^{(k)} + b_1)/a_{11} \\ x_2^{(k+1)} = (-a_{21}x_1^{(k)} - a_{23}x_3^{(k)} - \dots - a_{2n}x_n^{(k)} + b_2)/a_{22} \\ x_3^{(k+1)} = (-a_{31}x_1^{(k)} - a_{32}x_2^{(k)} - \dots - a_{3n}x_n^{(k)} + b_3)/a_{33} \\ \dots \\ x_n^{(k+1)} = (-a_{n1}x_1^{(k)} - a_{n2}x_2^{(k)} - \dots - a_{nn}x_n^{(k)} + b_n)/a_{nn} \end{cases}$$

Metoda Gaussa-Seidla



Jeżeli elementy wektora $x^{(k+1)}$ w układzie równań dla metody Jacobiego są obliczane sekwencyjnie (od 1 do n), to $k + 1$ wartości $x_i^{(k+1)}$ można obliczać z $x_j^{(k+1)}$ dla $j < i$ oraz z $x_j^{(k)}$ dla $j \geq i$.

Konstrukcja funkcji iteracji:

$$(L + D)x^{(k+1)} = -Ux^{(k)} + b$$

$$x^{(k+1)} = -(L + D)^{-1}Ux^{(k)} + (L + D)^{-1}b$$

Metoda Gaussa-Seidla, c.d.



Uwagi:

- Pojawia się macierz odwrotna $(L + D)^{-1}$.
- Macierz odwrotna do macierzy trójkątnej jest macierzą trójkątną. Dla obliczenia takiej macierzy stosuje się „specjalne”, oszczędne algorytmy.
- Macierz iteracji $T_G = -(L + D)^{-1}U$ jest taka sama w każdej iteracji – wystarczy obliczyć ją tylko raz.

Metoda Gaussa-Seidla, c.d.



Twierdzenia o zbieżności:

- (Tw. Stein-Rosenberg):
Jeżeli metoda Jacobiego jest zbieżna, to metoda G-S jest też zbieżna – i to szybciej zbieżna.
- Jeżeli macierz A jest ściśle przekątniowo dominująca (tzn. $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|$ dla $i = 1, 2, \dots, n$), to dla dowolnego $x^{(0)}$ ciągi metody Jacobiego i G-S są zbieżne do rozwiązania układu równań z macierzą A .

Metody relaksacyjne



AGH

Przybliżenie rozwiązania $x^{(k+1)}$ jest sumą ważoną ze współczynnikami ω przybliżenia otrzymanego metodą G-S i przybliżenia $x^{(k)}$

$$(\omega L + D)x^{(k+1)} = [(1 - \omega)D - \omega U]x^{(k)} + \omega b,$$

$$x^{(k+1)} = (\omega L + D)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U]x^{(k)} + \omega(\omega L + D)^{-1}b.$$

Dla

- $0 < \omega < 1$ – metody podrelaksacyjne,
- $\omega = 1$ – metoda G-S,
- $\omega > 1$ – metody nadrelaksacyjne.

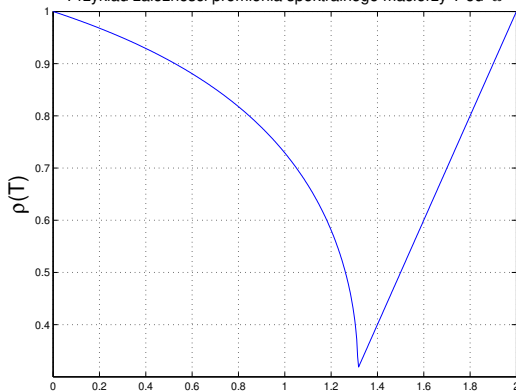
Metoda SOR – *Successive Over-Relaxation*

Zależność promienia spektralnego od ω

Np. dla

$$A = \begin{bmatrix} 0.7500 & 0.6250 \\ 0.8750 & 1.0000 \end{bmatrix}$$

Przykład zależności promienia spektralnego macierzy T od ω



Metoda SOR – *Successive Over-Relaxation* c.d

Zbieżność



AGH

www.agh.edu.pl

- Problem optymalnej wartości parametru ω .
- Twierdzenia o zbieżności:
 - (Kahan):
Jeżeli $a_{ii} \neq 0$ dla $i = 1, 2, \dots, n$,
to $\rho(T_\omega) < 1 \Leftrightarrow 0 < \omega < 2$, gdzie
 $\rho(T_\omega) = (\omega L + D)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U]$.
 - Jeżeli A jest dodatnio określona i trójdzielna,
to $\rho(T_G) = [\rho(T_J)]^2 < 1$,
a optymalna wartość parametru ω dla metody SOR
wynosi

$$\omega = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - [\rho(T_J)]^2}}.$$

Wartości i wektory własne macierzy



- Definicja wartości własnej i wektora własnego postępuje się równością:

$$Av = \lambda v.$$

- Stąd równanie:

$$\det(A - \lambda I) = 0.$$

- Kiedy równanie to można wykorzystać w obliczeniach numerycznych?

Szkic algorytmu metody potęgowej



Założenia:

- A ma pojedynczą dominującą wartość własną.
- Układ n wektorów własnych jest liniowo niezależny.

Algorytm

- 1 x – unormowany wektor początkowy,
- 2 $y = Ax$,
- 3 $y_p = ||y||$,
- 4 $x = \frac{1}{y_p}y$,
- 5 Sprawdź kryterium stopu (stop albo powrót do (2)).

Wartości końcowe:

- wektor własny x ,
- wartość własna y_p .

Odwrotna metoda potęgowa



- Stosowana dla znalezienia wartości własnej najbliższej zadanej wartości q .
- Założenie: A ma n liniowo niezależnych wektorów własnych v_k .
- Wartości własne macierzy $(A - qI)^{-1}$:

$$\frac{1}{\lambda_1 - q}, \frac{1}{\lambda_2 - q}, \dots, \frac{1}{\lambda_n - q}$$

z wektorami własnymi v_k .

- Metoda potęgowa zastosowana do macierzy $(A - qI)^{-1}$ jest zbieżna do

$$\frac{1}{\lambda_k - q} = \max_{i=1, \dots, n} \frac{1}{|\lambda_i - q|}.$$

Oszacowanie wartości własnych



Twierdzenie Gerszgorina o położeniu wartości własnych macierzy na płaszczyźnie zespolonej:

Tw.:

Każda wartość własna $\lambda \in \mathbb{C}$ macierzy $A \in \mathbb{C}^{n,n}$ leży przynajmniej w jednym z kół

$$K_i = \{\lambda \in \mathbb{C} : |\lambda - a_{ii}| \leq r_i = \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|\}.$$

Pomocne szczególnie wtedy, gdy koła K_i są rozłączne.

Algorytm z rozkładem QR



Szkic algorytmu:

- 1 rozkład macierzy A na iloczyn QR ,
- 2 $A = R \cdot Q$;
- 3 Sprawdź kryterium stopu – jeżeli nie, to wróć do 1 (z obliczoną macierzą A).

Szukane wartości własne są na przekątnej macierzy A .

Osobliwe układy równań



- Równania z prostokątną macierzą współczynników.
 - Wartości osobliwe (szczególne).
 - Rozkład SVD.
- będą omówione przy temacie **Aproksymacja**.