Numerické metody v inženýrských úlohách

(YNMI)

J. Kruis, M. Jirásek, P. Kabele, J. Zeman

Numerické metody v inženýrských úlohách

(YNMI)

Soustavy lineárních a nelineárních rovnic a metody jejich řešení

Jaroslav Kruis

Obsah

1 Matice, vektory

Definice. Nechť m a n jsou přirozená čísla (celá kladná). $m \cdot n$ čísel lze uspořádat do schématu

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & & a_{mn} \end{pmatrix}, \tag{1}$$

které se nazývá maticí $\boldsymbol{A}$ typu (m, n). Matice $\boldsymbol{A}$ obsahuje m řádků a n sloupců.

(Pojem matice zavedl roku 1850 anglický matematik J. J. Sylvester.)

Je-li $n = 1$, obsahuje matice jen jeden sloupec. Taková matice se nazývá sloupcovým vektorem. V tomto předmětu se vektorem rozumí vždy sloupcový vektor. Složky vektorů jsou označeny jen jedním indexem, např.

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ \vdots \\ a_{m1} \end{pmatrix} \Rightarrow \boldsymbol{v} = \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_m \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Označení

Matice jsou označeny tučnými velkými písmeny, např. $\boldsymbol{A}$,

vektory jsou označeny tučnými malými písmeny, např. $\boldsymbol{v}$,

prvky matic jsou označeny malými písmeny se dvěma indexy, např. a_{ij},

složky vektorů jsou označeny malými písmeny s jedním indexem, např. v_i.

Skupinu n vektorů $\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, ..., $\boldsymbol{v}_n$, z nichž každý obsahuje m složek, lze uložit do matice $\boldsymbol{V}$ typu (m, n), jednotlivé vektory tvoří sloupce matice $\boldsymbol{V}$. i-tá složka vektoru $\boldsymbol{v}_j$ je označena $v_{i(j)}$. Matice $\boldsymbol{V}$ má tvar

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} v_{1(1)} & v_{1(2)} & \cdots & v_{1(n)} \\ v_{2(1)} & v_{2(2)} & \cdots & v_{2(n)} \\ \vdots & & & \vdots \\ v_{m(1)} & v_{m(2)} & \cdots & v_{m(n)} \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Některé speciální matice

čtvercová matice: je-li počet řádků roven počtu sloupců, tedy $m = n$,

diagonální matice: pro $i = j$ platí $a_{ij} \neq 0$, pro $i \neq j$ platí $a_{ij} = 0$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & & & \\ & a_{22} & & \\ & & \ddots & \\ & & & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

horní lichoběžníková matice: pro $i \leq j$ platí $a_{ij} \neq 0$, pro $i > j$ platí $a_{ij} = 0$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots & a_{1m} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2m} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & a_{3m} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & a_{mm} & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}, \tag{5}$$

horní trojúhelníková matice: pro $i \leq j$ platí $a_{ij} \neq 0$, pro $i > j$ platí $a_{ij} = 0$

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ 0 & 0 & a_{33} & \dots & a_{3n} \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & a_{nn} \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Lineární kombinace vektorů

Definice. Nechť je dáno n vektorů $\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, ..., $\boldsymbol{v}_n$. Vektor $\boldsymbol{v} = c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots c_n\boldsymbol{v}_n$ se nazývá lineární kombinace vektorů $\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, ..., $\boldsymbol{v}_n$. Pro složky vektoru $\boldsymbol{v}$ platí

$$v_i = c_1 v_{i(1)} + c_2 v_{i(2)} + \ldots + c_n v_{i(n)}. \tag{7}$$

Definice. Vztah (7) definuje násobení matice a vektoru

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{v}\ , \tag{8}$$

což po složkách má tvar

$$\begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ v_{m1} & v_{m2} & \dots & v_{mn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_1 v_{11} + c_2 v_{12} + \dots + c_n v_{1n} \\ c_1 v_{21} + c_2 v_{22} + \dots + c_n v_{2n} \\ \vdots \\ c_1 v_{m1} + c_2 v_{m2} + \dots + c_n v_{mn} \end{pmatrix} . \quad (9)$$

2 Gaussův eliminační algoritmus

J. Rohn: Lineární algebra a optimalizace. Nakladatelství Karolinum, Praha, 2004: moderní věda přisuzuje autorství Gaussovi (1810); metoda je však popsaná ve staročínském traktátu “Matematika v devíti knihách” z roku 263.

Nechť je dána matice $\boldsymbol{A}$ typu (m, n) ve tvaru

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ a_{m1} & \dots & \dots & a_{mn} \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Snahou je získat horní lichoběžníkový tvar matice $\boldsymbol{A}$ pomocí tzv.

ekvivalentních úprav.

Nejprve je třeba ověřit, zda-li není možné získat horní lichoběžníkový tvar matice pouhou výměnou řádků a sloupců. To je možné pouze výjimečně.

Příklad. Nechť je dána matice

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 0 & 2 & 0 \\ 0 & -2 & 4 \\ 4 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Výměnou prvního a posledního řádku a dále výměnou druhého a

třetího sloupce se získá matice

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 4 & -2 & 0 \\ 0 & 4 & -2 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}. \tag{12}$$

Je-li $a_{11} = 0$, změní se pořadí řádků a sloupců tak, aby na pozici $(1, 1)$ byl nenulový prvek. Je-li $a_{11} \neq 0$, od druhého řádku se odečte první řádek přenásobený $\frac{a_{21}}{a_{11}}$. Tím se na pozici $(2, 1)$ objeví nula. Odečtením prvního řádku přenásobeného $\frac{a_{i1}}{a_{11}}$ od i-tého řádku se obejví nula i na pozici $(i, 1)$. První krok eliminačního algoritmu tedy vynuluje všechny prvky prvního sloupce kromě prvku a_{11}. Po prvním

kroku se získá matice ve tvaru

$$\boldsymbol{A}^{(1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & \dots & a_{1n}^{(1)} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{m2}^{(1)} & \dots & a_{mn}^{(1)} \end{pmatrix}. \tag{13}$$

Je-li $a_{22}^{(1)} = 0$, změní se pořadí řádků a sloupců matice $\boldsymbol{A}^{(1)}$ tak, aby na pozici $(2, 2)$ byl nenulový prvek. Je-li $a_{22}^{(1)} \neq 0$, od třetího řádku se odečte druhý řádek přenásobený $\frac{a_{32}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$. Tím se na pozici $(3, 2)$ objeví nula. Odečtením druhého řádku přenásobeného $\frac{a_{i2}^{(1)}}{a_{22}^{(1)}}$ od i-tého řádku

se obejví nula i na pozici $(i, 2)$. Druhý krok eliminačního algoritmu tedy vynuluje všechny prvky druhého sloupce pod diagonálním prvkem $a_{22}^{(1)}$. Po druhém kroku se získá matice

$$\boldsymbol{A}^{(2)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & \dots & a_{1n}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & \dots & a_{2n}^{(2)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(2)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & a_{m3}^{(2)} & \dots & a_{mn}^{(2)} \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Pokračováním algoritmu se získá některý z následujících tvarů

$$\boldsymbol{A}^{(i-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(i-1)} & a_{12}^{(i-1)} & a_{13}^{(i-1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(i-1)} \\ 0 & a_{22}^{(i-1)} & a_{23}^{(i-1)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(i-1)} \\ \vdots & 0 & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{ii}^{(i-1)} & \dots & a_{in}^{(i-1)} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$\boldsymbol{A}^{(m-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(m-1)} & a_{12}^{(m-1)} & \dots & a_{1n}^{(m-1)} \\ 0 & a_{22}^{(m-1)} & \dots & a_{2n}^{(m-1)} \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{mm}^{(m-1)} \end{pmatrix}, \tag{16}$$

$$\boldsymbol{A}^{(m-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(m-1)} & a_{12}^{(m-1)} & a_{13}^{(m-1)} & \dots & \dots & a_{1n}^{(m-1)} \\ 0 & a_{22}^{(m-1)} & a_{23}^{(m-1)} & \dots & \dots & a_{2n}^{(m-1)} \\ \vdots & 0 & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{mm}^{(m-1)} & \dots & a_{mn}^{(m-1)} \end{pmatrix}. \tag{17}$$

Speciální roli hrají matice ve tvaru

$$\boldsymbol{A}^{(n-1)} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(n-1)} & a_{12}^{(n-1)} & \dots & a_{1n}^{(n-1)} & a_{1,n+1}^{(n-1)} \\ 0 & a_{22}^{(n-1)} & \dots & a_{2n}^{(n-1)} & a_{2,n+1}^{(n-1)} \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{nn}^{(n-1)} & a_{n,n+1}^{(n-1)} \end{pmatrix} . \quad (18)$$

Příklad. (Budinský, Charvát: Matematika I, SNTL/ALFA, 1987)

Nechť je dána matice

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 & 2 & 4 \\ 2 & 6 & 3 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 3 & 1 & 5 \\ -2 & 2 & 13 & -2 & 1 \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Provedením Gaussova algoritmu vyjde

$$\boldsymbol{A}^{(4)} = \begin{pmatrix} 1 & 3 & -2 & 2 & 4 \\ 0 & 4 & 1 & 3 & 9 \\ 0 & 0 & 7 & -4 & -9 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{20}$$

3 Soustavy lineárních algebraických rovnic a jejich řešitelnost

Definice. Soustavou lineárních algebraických rovnic se rozumí soustava

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 \quad &+ \quad \ldots a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 \quad &+ \quad \ldots a_{2n}x_n = b_2 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 \quad &+ \quad \ldots a_{mn}x_n = b_m \end{aligned} \tag{21}$$

Poznámka. Soustava (21) se dá úsporně zapsat pomocí matice a vektorů do tvaru

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

Definice. Nechť je dána matice $\boldsymbol{A}$ typu (m, n) v horním lichoběžníkovém tvaru

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22} & a_{23} & \dots & \dots & a_{2n} \\ \vdots & 0 & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & a_{hh} & \dots & a_{hn} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0_{mn} \end{pmatrix}. \tag{22}$$

Hodností matice $\boldsymbol{A}$ se nazývá počet nenulových řádků, tj. h.

Definice. Nechť je dána soustava m lineárních algebraických rovnic o n neznámých ve tvaru $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$. Matice $\boldsymbol{A}$ je typu (m, n), vektor $\boldsymbol{x}$ obsahuje n složek, $\boldsymbol{b}$ obsahuje m složek. Matice $[\boldsymbol{A}|\boldsymbol{b}]$ typu $(m, n+1)$ se nazývá rozšířená matice soustavy.

Věta (o řešitelnosti). Nechť je dána soustava m lineárních algebraických rovnic o n neznámých s maticí $\boldsymbol{A}$ typu (m, n), vektorem $\boldsymbol{x}$ obsahujícím n složek a vektorem $\boldsymbol{b}$ obsahujícím m složek.

1. Je-li $m = n$ a je-li hodnost h matice soustavy rovna hodnosti $\tilde{h}$ rozšířené matice soustavy, přičemž $\tilde{h} = h = m = n$, má soustava právě jedno řešení.

2. Je-li $m < n$ a je-li hodnost h matice soustavy rovna hodnosti $\tilde{h}$ rozšířené matice soustavy (přičemž je $\tilde{h} = h \leq m$), má soustava nekonečně mnoho řešení.

3. Je-li $m > n$ a je-li hodnost h matice soustavy rovna hodnosti $\tilde{h}$ rozšířené matice soustavy, přičemž je $\tilde{h} = h = n$, má soustava

právě jedno řešení.

4. Je-li $m > n$ a je-li hodnost h matice soustavy rovna hodnosti $\tilde{h}$ rozšířené matice soustavy, přičemž je $\tilde{h} = h < n$, má soustava nekonečně mnoho řešení.

5. Je-li hodnost h matice soustavy menší než hodnost $\tilde{h}$ rozšířené matice soustavy, nemá soustava řešení.

Věta (Frobeniova). Soustava lineárních algebraických rovnic má alespoň jedno řešení právě tehdy, když matice soustavy a rozšířená matice soustavy mají tutéž hodnost.

Příklady.

1. $m = n = h = \tilde{h} = 2$, soustava má právě jedno řešení

$$\left(\begin{array}{cc|c} 2 & -1 & 3 \\ 0 & 2 & 7 \end{array}\right). \tag{23}$$

2. $\tilde{h} = h = 2 \leq m = 2 < n = 3$, soustava má nekonečně mnoho řešení

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & -1 & 0 & 7 \\ 0 & 2 & 3 & 4 \end{array}\right). \tag{24}$$

3. $m = 3 > n = 2 = h = \tilde{h}$, soustava má právě jedno řešení

$$\left(\begin{array}{cc|c} 2 & -1 & 3 \\ 0 & 2 & 7 \\ 0 & 0 & 0 \end{array}\right). \tag{25}$$

4. $m = 4 > n = 3 > h = \tilde{h} = 2$, soustava má nekonečně mnoho řešení

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 2 & -1 & 0 & 3 \\ 0 & 2 & 1 & 7 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{array}\right). \tag{26}$$

5. $h = 1 < \tilde{h} = 2$, soustava nemá řešení

$$\left(\begin{array}{cc|c} 2 & -1 & 7 \\ 0 & 0 & 4 \end{array}\right). \tag{27}$$

Lineární závislost a nezávislost vektorů

Definice. Platí-li rovnice

$$c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots c_n\boldsymbol{v}_n = \mathbf{0} \tag{28}$$

pouze pro $c_1 = c_2 = \ldots = c_n = 0$, nazývá se skupina vektorů $\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, . . ., $\boldsymbol{v}_n$ lineárně nezávislou. V opačném případě se skupina vektorů nazývá lineárně závislou.

Nejdůležitějším případem je skupina vektorů $\boldsymbol{v}_1$, $\boldsymbol{v}_2$, . . ., $\boldsymbol{v}_n$, z nichž každý obsahuje n složek. Vektory lze uložit do sloupců matice $\boldsymbol{V}$

typu (n, n) ve tvaru

$$\boldsymbol{V} = \begin{pmatrix} v_{1(1)} & v_{1(2)} & \dots & v_{1(n)} \\ v_{2(1)} & v_{2(2)} & \dots & v_{2(n)} \\ \vdots & & & \vdots \\ v_{n(1)} & v_{n(2)} & \dots & v_{n(n)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{11} & v_{12} & \dots & v_{1n} \\ v_{21} & v_{22} & \dots & v_{2n} \\ \vdots & & & \vdots \\ v_{n1} & v_{n2} & \dots & v_{nn} \end{pmatrix}. \quad (29)$$

Věta. Nechť je dáno n vektorů $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n$, každý o m složkách. Nechť jsou tyto vektory uloženy jako sloupce matice $\boldsymbol{V}$. Vektory $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n$ jsou lineárně nezávislé právě tehdy, když má soustava $\boldsymbol{V}\boldsymbol{c} = \boldsymbol{0}$ právě jedno nulové (triviální) řešení.

Definice. Všechny vektory o n složkách tvoří vektorový prostor V. Bází vektorového prostoru je libovolná skupina lineárně nezávislých vektorů $\boldsymbol{v}_1, \ldots, \boldsymbol{v}_n$.

Věta. Libovolný vektor $\boldsymbol{v}$ z vektorového prostoru V lze vyjádřit jako lineární kombinaci bázových vektorů ve tvaru

$$\boldsymbol{v} = c_1\boldsymbol{v}_1 + c_2\boldsymbol{v}_2 + \ldots c_n\boldsymbol{v}_n. \tag{30}$$

Nechť je dána báze $\boldsymbol{b}_1, \ldots, \boldsymbol{b}_n$ a příslušná matice $\boldsymbol{B}$.

$$\boldsymbol{v} = v_1^{(b)}\boldsymbol{b}_1 + v_2^{(b)}\boldsymbol{b}_2 + \ldots v_n^{(b)}\boldsymbol{b}_n = \tag{31}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} v_i^{(b)}\boldsymbol{b}_i = \boldsymbol{B}\boldsymbol{v}^{(b)}. \tag{32}$$

Nechť je dána druhá báze $\boldsymbol{g}_1, \ldots, \boldsymbol{g}_n$ a příslušná matice $\boldsymbol{G}$.

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} v_i^{(g)}\boldsymbol{g}_i = \boldsymbol{G}\boldsymbol{v}^{(g)}. \tag{33}$$

vyjádření báze $\boldsymbol{g}_i$ v bázi $\boldsymbol{b}_j$

$$\boldsymbol{g}_j = g^{(b)}_{1(j)}\boldsymbol{b}_1 + g^{(b)}_{2(j)}\boldsymbol{b}_2 + \ldots g^{(b)}_{n(j)}\boldsymbol{b}_n = \sum_{i=1}^{n} g^{(b)}_{i(j)}\boldsymbol{b}_i \quad (34)$$

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} v^{(g)}_i \boldsymbol{g}_i = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} g^{(b)}_{k(i)} v^{(g)}_i \boldsymbol{b}_k = \sum_{k=1}^{n} v^{(b)}_k \boldsymbol{b}_k \quad (35)$$

$$\boldsymbol{v}^{(b)} = \boldsymbol{G}^{(b)}\boldsymbol{v}^{(g)} \quad (36)$$

vyjádření báze $\boldsymbol{b}_i$ v bázi $\boldsymbol{g}_j$

$$\boldsymbol{b}_j = b^{(g)}_{1(j)}\boldsymbol{g}_1 + b^{(g)}_{2(j)}\boldsymbol{g}_2 + \ldots b^{(g)}_{n(j)}\boldsymbol{g}_n = \sum_{i=1}^{n} b^{(g)}_{i(j)}\boldsymbol{g}_i \quad (37)$$

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} v_i^{(b)} \boldsymbol{b}_i = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} b_{k(i)}^{(g)} v_i^{(b)} \boldsymbol{g}_k = \sum_{k=1}^{n} v_k^{(g)} \boldsymbol{g}_k \quad (38)$$

$$\boldsymbol{v}^{(g)} = \boldsymbol{B}^{(g)} \boldsymbol{v}^{(b)} \quad (39)$$

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} v_i^{(b)} \boldsymbol{b}_i = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} b_{k(i)}^{(g)} v_i^{(b)} \boldsymbol{g}_k = \quad (40)$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} g_{l(k)}^{(b)} b_{k(i)}^{(g)} v_i^{(b)} \boldsymbol{b}_l = \sum_{l=1}^{n} v_l^{(b)} \boldsymbol{b}_l \quad (41)$$

$$v_l^{(b)} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} g_{l(k)}^{(b)} b_{k(i)}^{(g)} v_i^{(b)} \quad \Rightarrow \sum_{k=1}^{n} g_{l(k)}^{(b)} b_{k(i)}^{(g)} = \delta_{li} \tag{42}$$

$$\boldsymbol{v}^{(b)} = \boldsymbol{G}^{(b)} \boldsymbol{B}^{(g)} \boldsymbol{v}^{(b)} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{G}^{(b)} \boldsymbol{B}^{(g)} = \boldsymbol{I} \tag{43}$$

Nechť je dána další báze $\boldsymbol{h}_1, \ldots, \boldsymbol{h}_n$ a příslušná matice $\boldsymbol{H}$.

Vyjádření báze $\boldsymbol{h}_i$ v bázi $\boldsymbol{g}_j$ má tvar

$$\boldsymbol{h}_j \quad = \quad \sum_{i=1}^{n} h_{i(j)}^{(g)} \boldsymbol{g}_i \tag{44}$$

Libovolný vektor

$$\boldsymbol{v} = \sum_{i=1}^{n} v_i^{(h)} \boldsymbol{h}_i = \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} h_{k(i)}^{(g)} v_i^{(h)} \boldsymbol{g}_k = \tag{45}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{n} g_{l(k)}^{(b)} h_{k(i)}^{(g)} v_i^{(h)} \boldsymbol{b}_l = \sum_{l=1}^{n} v_l^{(b)} \boldsymbol{b}_l \tag{46}$$

$$\boldsymbol{v}^{(b)} = \boldsymbol{G}^{(b)} \boldsymbol{H}^{(g)} \boldsymbol{v}^{(h)} \tag{47}$$

4 Kvadratické formy

Nechť je dána kvadratická funkce n proměnných ve tvaru

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{x}) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_ix_j = && (48)\\
&= a_{11}x_1x_1 + a_{12}x_1x_2 + \ldots a_{1n}x_1x_n + \\
&+ a_{21}x_2x_1 + a_{22}x_2x_2 + \ldots a_{2n}x_2x_n + \\
&\qquad\qquad \vdots \\
&+ a_{n1}x_nx_1 + a_{n2}x_nx_2 + \ldots a_{nn}x_nx_n = \\
&= \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}. && (49)
\end{aligned}
$$

Speciální tvar kvadratických forem

$$f(\boldsymbol{x}) = \sum_{i=1}^{n} d_{ii} x_i^2 = \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{D} \boldsymbol{x}. \tag{50}$$

5 Vlastní čísla a vektory

1. motivace

Rovnice elipsy v souřadnicovém systému $x'y'$ má tvar

$$\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} = 1 \quad \Rightarrow \quad b^2x'^2 + a^2y'^2 = a^2b^2, \tag{51}$$

např.

$$3^2x'^2 + 5^2y'^2 = (3 \cdot 5)^2 = 225. \tag{52}$$

Transformace mezi souřadnicemi $x'y'$ a xy mají tvar

$$x' = (x - x_S)\cos\alpha + (y - y_S)\sin\alpha, \tag{53}$$

$$y' = -(x - x_S)\sin\alpha + (y - y_S)\cos\alpha, \tag{54}$$

Dosazením transformačních vztahů (53) a (54) do rovnice elipsy v souřadnicovém systému xy vychází

$$\begin{aligned}
&(b^2\cos^2\alpha + a^2\sin^2\alpha)x^2 + (b^2\sin^2\alpha + a^2\cos^2\alpha)y^2 + \\
&(b^2\sin 2\alpha - a^2\sin 2\alpha)xy + \\
&(-2b^2x_S\cos^2\alpha - b^2y_S\sin 2\alpha - 2a^2x_S\sin^2\alpha + a^2y_S\sin 2\alpha)x + \\
&(-2b^2y_S\sin^2\alpha - b^2x_S\sin 2\alpha - 2a^2y_S\cos^2\alpha + a^2x_S\sin 2\alpha)y + \\
&\big(b^2x_S^2\cos^2\alpha + b^2y_S^2\sin^2\alpha + b^2x_Sy_S\sin 2\alpha + \\
&a^2x_S^2\sin^2\alpha + a^2y_S^2\cos^2\alpha - a^2x_Sy_S\sin 2\alpha - a^2b^2\big) = 0,
\end{aligned} \tag{55}$$

po dosazení číselných hodnot pak

$$14,76x^2 + 19,24y^2 - 15,36xy - 72x - 54y + 0 = 0. \tag{56}$$

Problém: Je možné volbou α odstranit člen $15,36xy$?

Obecněji: rovnice kvadrik lze vyjádřit v obecném tvaru

$$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} + \boldsymbol{b}^T \boldsymbol{x} + c = 0. \tag{57}$$

Problém: Je možné transformovat souřadnice tak, aby byla rovnice kvadriky ve tvaru

$$(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_s)^T \boldsymbol{D} (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}_s) + c = 0, \tag{58}$$

kde $\boldsymbol{D}$ je diagonální matice a $\boldsymbol{x}_s$ je daný vektor?

2. motivace

Tenzor setrvačnosti

jednotkový směrový vektor $\boldsymbol{s}$,

průvodič bodu B je $\boldsymbol{x}$,

vzdálenost bodu B od počátku $r = \|\boldsymbol{x}\| = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}$,

velikost průmětu $\boldsymbol{x}$ do směru $\boldsymbol{s}$ je $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{s}$,

vzdálenost bodu B od osy dané vektorem $\boldsymbol{s}$ je
$p = \sqrt{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} - (\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{s})^2}$

moment setrvačnosti tělesa k ose $J = \int p^2 \varrho \, \mathrm{d}V$

$$
\begin{aligned}
p^2 &= \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x} - (\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{s})(\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{s}) = && (59)\\
&= r^2 \boldsymbol{s}^T \boldsymbol{s} - \boldsymbol{s}^T \boldsymbol{x} \boldsymbol{x}^T \boldsymbol{s} = && (60)\\
&= \boldsymbol{s}^T \left(r^2 \boldsymbol{I} - \boldsymbol{x} \boldsymbol{x}^T \right) \boldsymbol{s} && (61)
\end{aligned}
$$

$$\boldsymbol{J} = \int \left(r^2 \boldsymbol{I} - \boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^T\right) \varrho \, \mathrm{d}V = \tag{62}$$

$$\int \varrho \begin{pmatrix} y^2 + z^2 & -xy & -xz \\ -yx & x^2 + z^2 & -yz \\ -zx & -zy & x^2 + y^2 \end{pmatrix} \mathrm{d}V = \tag{63}$$

$$= \begin{pmatrix} J_x & -D_{xy} & -D_{xz} \\ -D_{yx} & J_y & -D_{yz} \\ -D_{zx} & -D_{zy} & J_z \end{pmatrix} \tag{64}$$

$$J = \int p^2 \varrho \, \mathrm{d}V = \boldsymbol{s}^T \boldsymbol{J} \boldsymbol{s}. \tag{65}$$

Definice. Nechť je dána matice $\boldsymbol{A} \in R^{n \times n}$. Číslo λ a nenulový vektor $\boldsymbol{v}$ splňující rovnici

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \lambda \boldsymbol{v} \tag{66}$$

se nazývají vlastní číslo a vlastní vektor.

V rovnici (66) lze převést výraz na pravé straně na levou, což vede na

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} - \lambda \boldsymbol{I}\boldsymbol{v} = (\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}\,. \tag{67}$$

Soustava lineárních algebraických rovnic (67) je homogenní (má nulovou pravou stranu). Takové soustavy mají netriviální řešení (tj. $\boldsymbol{v} \neq \boldsymbol{0}$) právě tehdy, když je matice soustavy $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}$ singulární. To lze vyjádřit např. vztahem

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0\,. \tag{68}$$

Je-li matice soustavy singulární, existuje nekonečně mnoho řešení, ze kterých lze vždy vybrat takové, že jeho norma (velikost) je rovna jedné, tedy

$$\boldsymbol{v}^T \boldsymbol{v} = 1. \tag{69}$$

Souhrnně lze psát všechna vlastní čísla a vektory

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda} \tag{70}$$

pomocí matice $\boldsymbol{V}$, jejíž sloupce jsou tvořeny vlastními vektory $\boldsymbol{v}_i$, tedy

$$\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{v}_1\ \boldsymbol{v}_2\ \ldots \boldsymbol{v}_n) \tag{71}$$

a diagonální matice $\boldsymbol{\Lambda}$, na jejíž diagonále jsou vlastní čísla λ_i. Matice $\boldsymbol{V}$ se nazývá fundamentální matice.

Definice. Matice $\boldsymbol{A} \in R^{n \times n}$ se nazývá maticí jednoduché struktury právě tehdy, když má n lineárně nezávislých vlastních vektorů.

Věta. Vlastní vektory $\boldsymbol{v}_i$ a $\boldsymbol{v}_j$ příslušející různým vlastním číslům λ_i a λ_j symetrické matice $\boldsymbol{A}$ jsou ortogonální, tj. $\boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{v}_j = 0$.

Důkaz. λ_i a $\boldsymbol{v}_i$ splňují rovnici

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i = \lambda_i \boldsymbol{v}_i \ , \tag{72}$$

λ_j a $\boldsymbol{v}_j$ splňují rovnici

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j = \lambda_j \boldsymbol{v}_j \ . \tag{73}$$

Přenásobením rovnice (72) vektorem $\boldsymbol{v}_j^T$ zleva vyjde

$$\boldsymbol{v}_j^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i = \lambda_i \boldsymbol{v}_j^T \boldsymbol{v}_i \ , \tag{74}$$

zatímco přenásobením rovnice (73) vektorem $\boldsymbol{v}_i^T$ zleva vyjde

$$\boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{v}_j = \lambda_j \boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{v}_j \ . \tag{75}$$

Odečtením rovnice (75) od rovnice (74) vychází

$$\boldsymbol{v}_j^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{v}_i - \boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{v}_j = 0 = (\lambda_i - \lambda_j) \boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{v}_j \ , \tag{76}$$

protože s ohledem na symetrii matice platí
$\boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{v}_j = \boldsymbol{v}_j^T \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{v}_j$ a evidentně platí $\boldsymbol{v}_j^T \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{v}_j$.
Protože jsou podle předpokladu věty vlastní čísla λ_i a λ_j různá, platí $\lambda_i - \lambda_j \neq 0$ a proto musí být $\boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{v}_j = 0$. Tím je ortogonalita dokázána.

Věta. Má-li matice $\boldsymbol{A} \in R^{n \times n}$ n různých vlastních čísel, tvoří její vlastní vektory $\boldsymbol{v}_i$ bázi prostoru R^n.

Důkaz. Podle předcházející věty jsou vlastní vektory odpovídající dvěma různým vlastním číslům ortogonální. Proto jsou všechny vlastní vektory matice $\boldsymbol{A}$ vzájemně ortogonální a tvoří proto bázi prostoru.

Zajímavé výsledky lze obdržet zkoumáním kvadratické formy $\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$, kde $\boldsymbol{A}$ je symetrická matice. Libovolný vektor $\boldsymbol{x}$ lze vyjádřit jako lineární kombinaci vlastních vektorů $\boldsymbol{v}_i$, které podle předcházející věty tvoří bázi prostoru R^n. Vektory $\boldsymbol{x}$ mají tedy tvar

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} y_i \boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{V}\boldsymbol{y} \ , \tag{77}$$

kde y_i jsou součinitele lineární kombinace, které mohou být shromážděny ve vektoru $\boldsymbol{y}$. Součet $\sum_{i=1}^{n} y_i \boldsymbol{v}_i$ lze zapsat pomocí

matice $\boldsymbol{V}$, jejíž sloupce jsou tvořeny vlastními vektory $\boldsymbol{v}_i$. Dosazením vyjádření (77) do kvadratické formy vychází

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\sum_{i=1}^{n} y_i\boldsymbol{v}_i = \boldsymbol{x}^T\sum_{i=1}^{n} y_i\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i =$$

$$= \boldsymbol{x}^T\sum_{i=1}^{n} y_i\lambda_i\boldsymbol{v}_i = \left(\sum_{j=1}^{n} y_j\boldsymbol{v}_j\right)\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\lambda_i\boldsymbol{v}_i\right) . \qquad (78)$$

S uvážením ortogonality vlastních tvarů lze provést další úpravy

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \left(\sum_{j=1}^{n} y_j\boldsymbol{v}_j\right)\left(\sum_{i=1}^{n} y_i\lambda_i\boldsymbol{v}_i\right) = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i y_i^2 = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y}. \qquad (79)$$

V matematické literatuře se řadí vlastní čísla od největšího k

nejmenšímu, tedy

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \lambda_3 \geq \ldots \geq \lambda_{n-1} \geq \lambda_n \ , \tag{80}$$

v mechanice naopak od nejmenšího k největšímu, tedy

$$\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3 \leq \ldots \leq \lambda_{n-1} \leq \lambda_n \ . \tag{81}$$

Velikost kvadratické formy $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}$ lze odhadnout shora i zdola

$$\lambda_1 \sum_{i=1}^{n} y_i^2 \leq \sum_{i=1}^{n} \lambda_i y_i^2 \leq \lambda_n \sum_{i=1}^{n} y_i^2 . \tag{82}$$

Za pozornost stojí skalární součin $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x}$, jehož tvar je

$$\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{x} = \left(\sum_{j=1}^{n} y_j \boldsymbol{v}_j \right)^T \left(\sum_{i=1}^{n} y_i \boldsymbol{v}_i \right) = \sum_{i=1}^{n} y_i^2 \tag{83}$$

nebo ve vektorovém zápisu

$$\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}\,. \tag{84}$$

Kombinací (82) a (83) vychází

$$\lambda_1 \leq \frac{\sum_{i=1}^n \lambda_i y_i^2}{\sum_{i=1}^n y_i^2} = \frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}} \leq \lambda_n. \tag{85}$$

Platí tedy

$$\lambda_1 = \min_{\boldsymbol{x}} \frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}} = \min_{\boldsymbol{y}} \frac{\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}}, \tag{86}$$

$$\lambda_n = \max_{\boldsymbol{x}} \frac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}} = \max_{\boldsymbol{y}} \frac{\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y}}{\boldsymbol{y}^T\boldsymbol{y}}. \tag{87}$$

Definice. Podíl $\dfrac{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{x}}$ se nazývá Rayleighův podíl nebo také Rayleighův kvocient.

Definice. Matice $\boldsymbol{V} \in R^{n\times n}$ je ortogonální právě tehdy, když platí

$$\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I} \tag{88}$$

Definice. Matice $\boldsymbol{V} \in R^{n\times p}$, kde $p < n$, je semiortogonální právě tehdy, když platí

$$\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{V} = \boldsymbol{I} \quad \text{a} \quad \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^T \neq \boldsymbol{I} \tag{89}$$

Nechť je dána regulární matice $\boldsymbol{A}$ a soustava lineárních algebraických rovnic

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}. \tag{90}$$

Vektor $\boldsymbol{x}$ lze ale také psát jako lineární kombinaci vlastních vektorů matice $\boldsymbol{A}$. Soustava rovnic má tedy tvar

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}. \tag{91}$$

Přenásobením fundamentální maticí zleva vychází

$$\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{b} \tag{92}$$

nebo po složkách

$$y_i = \frac{1}{\lambda_i}\boldsymbol{v}_i^T\boldsymbol{b}. \tag{93}$$

Vektor $\boldsymbol{x}$ má tvar

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{b}. \tag{94}$$

Porovnáním s (90) vychází

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^T. \tag{95}$$

Zápis po složkách je

$$\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} y_i \boldsymbol{v}_i = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda_i} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^T \boldsymbol{b} \tag{96}$$

a dále pak

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda_i} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^T. \tag{97}$$

Věta. Nechť je dána regulární matice $\boldsymbol{A} \in R^{n \times n}$. Inverzní matice $\boldsymbol{A}^{-1}$ má tvar

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda_i} \boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^T = \boldsymbol{V} \boldsymbol{\Lambda}^{-1} \boldsymbol{V}^T. \tag{98}$$

Důkaz. Byl proveden během odvození.

6 Metody řešení soustav lineárních algebraických rovnic

- přímé (finitní) metody
  - Gaussova eliminační metoda
  - $\boldsymbol{LDL}^T$ rozklad (symetrické pozitivně definitní matice)
  - $\boldsymbol{LL}^T$ rozklad (Choleského rozklad, symetrické pozitivně definitní matice)
  - $\boldsymbol{LU}$ rozklad (obecné soustavy, někdy nutná pivotáž)
  - řídké řešiče
- iterační metody

- metoda největšího spádu (symetrické pozitivně definitní matice, minimalizace $\|\boldsymbol{e}\|_A$)
- metoda sdružených gradientů (symetrické pozitivně definitní matice)
- metoda bi-konjugovaných gradientů (BiCG)
- GMRES (obecné soustavy, nutné restarty)
- ORTOMIN (minimalizace $\|\boldsymbol{r}_2\|$)
- relaxační metoda
- Jacobiova metoda (konverguje pro striktně diagonálně dominantní matice)
- Gaussova-Seidelova metoda (konverguje pro striktně diagonálně dominantní matice)

- Successive Over Relaxation method (SOR)
- Symmetric Successive Over Relaxation method (SSOR)

Počty aritmetických operací přímých metod

Gaussova eliminace, $\boldsymbol{LU}$	$\frac{2}{3}n^3$
$\boldsymbol{LDL}^T$	$\frac{1}{3}n^3$
pásový $\boldsymbol{LDL}^T$ rozklad	$2np^2$

6.1 Rozklad $\boldsymbol{LDL}^T$

1. pomocná věta. Součin dvou dolních trojúhelníkových matic je dolní trojúhelníková matice.

2. pomocná věta. Inverzní matice k dolní trojúhelníkové matici je dolní trojúhelníková matice.

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{LDL}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Lz} = \boldsymbol{b} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{z} \tag{99}$$

$$\boldsymbol{DL}^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{z} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x} \tag{100}$$

$$\boldsymbol{A}_{k+1} = \boldsymbol{L}_k^{-1}\boldsymbol{A}_k =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & 0 \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ 0 & & -\dfrac{a_{k+1,k}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -\dfrac{a_{nk}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}} & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11}^{(k)} & & & & \\ & \ddots & & a_{ij}^{(k)} & \\ & & a_{kk}^{(k)} & & \\ & & a_{k+1,k}^{(k)} & & \\ & 0 & \vdots & \ddots & \\ & & a_{nk}^{(k)} & & a_{nn}^{(k)} \end{pmatrix} \tag{101}$$

$$\boldsymbol{A}_{k+1} = \begin{pmatrix} a_{11}^{(k+1)} & & & & & \\ & \ddots & & & a_{ij}^{(k+1)} & \\ & & a_{kk}^{(k+1)} & a_{k,k+1}^{(k+1)} & & \\ & & 0 & a_{k+1,k+1}^{(k+1)} & & \\ & & \vdots & \vdots & \ddots & \\ & & 0 & a_{n,k+1}^{(k+1)} & & a_{nn}^{(k+1)} \end{pmatrix} \tag{102}$$

$$\boldsymbol{A}_{k+2} = \boldsymbol{L}_{k+1}^{-1}\boldsymbol{A}_{k+1}$$

$$\boldsymbol{L}_{k+1}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -\dfrac{a_{k+2,k+1}^{(k+1)}}{a_{k+1,k+1}^{(k+1)}} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -\dfrac{a_{n,k+1}^{(k+1)}}{a_{k+1,k+1}^{(k+1)}} & & & 1 \end{pmatrix} \tag{103}$$

$$\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{L}_{n-1}^{-1} \cdots \boldsymbol{L}_2^{-1} \boldsymbol{L}_1^{-1} \boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}^{-1} \boldsymbol{A} \tag{104}$$

$\boldsymbol{L}^{-1}$ je dolní trojúhelníková matice

$\tilde{\boldsymbol{A}}$ je horní trojúhelníková matice

$$\tilde{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{D}\boldsymbol{U} \tag{105}$$

$$\boldsymbol{D}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U} \tag{106}$$

$$\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{U}^T \boldsymbol{D} \boldsymbol{L}^T = \boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{U} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{L}^T = \boldsymbol{U} \tag{107}$$

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{D}\boldsymbol{L}^T \tag{108}$$

7 Extrémy kvadratických funkcí, řešení soustav lineárních rovnic

Kvadratickou funkci n proměnných $f(\boldsymbol{x})$ lze zapsat pomocí matice $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$ a vektoru $\boldsymbol{b} \in R^n$ takto

$$f(\boldsymbol{x}) \quad = \quad \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} + c. \tag{109}$$

Poloviny u koeficientů a_{ij} a znaménka minus před koeficienty b_i byly zvoleny s ohledem na další zápis. Pro obecnou kvadratickou funkci n proměnných lze vždy určit a_{ij} a b_i tak, že funkce má výše uvedený tvar. Konstanta c nemá vliv na polohu extrému, jen na jeho velikost. V dalších úvahách se bude předpokládat $c = 0$.

Definice. Matice $\boldsymbol{A} \in R^{n \times n}$ se nazývá pozitivně definitní právě tehdy, když pro libovolný nenulový vektor $\boldsymbol{x} \in R^n$ platí $\boldsymbol{x}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x} > 0$.

Poznámka. Velmi mnoho inženýrských úloh lze zformulovat tak, že se hledá minimum kvadratické funkce n proměnných s pozitivně definitní maticí.

Věta. Matice $\boldsymbol{A} \in R^{n \times n}$ je pozitivně definitní právě tehdy, když jsou její všechna vlastní čísla kladná.

Věta. Nechť je matice $\boldsymbol{A}$ symetrická a pozitivně definitní. Funkce $f(\boldsymbol{x})$ nabývá svého minima v bodě $\bar{\boldsymbol{x}}$ právě tehdy, když $\bar{\boldsymbol{x}}$ je řešením soustavy lineárních algebraických rovnic $\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b}$.

Důkaz. Nechť funkce $f(\boldsymbol{x})$ nabývá svého minima v $\bar{\boldsymbol{x}}$. Pro libovolný vektor $\boldsymbol{v}$ a skalární parametr s pak platí

$$f(\bar{\boldsymbol{x}} + s\boldsymbol{v}) = \frac{1}{2}\bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} + s\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} + \frac{s^2}{2}\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} - \bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{b} - s\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{b} \tag{110}$$

Vzhledem k tomu, že $\bar{\boldsymbol{x}}$ i $\boldsymbol{v}$ jsou dané vektory, jedinou proměnnou je s a minimum nastává pro

$$\frac{\mathrm{d}f(\bar{\boldsymbol{x}} + s\boldsymbol{v})}{\mathrm{d}s} = \bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} + s\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{b} = 0 \tag{111}$$

s uvážením, že podle předpokladu je minimum v $\bar{\boldsymbol{x}}$, platí $s = 0$, což vede na výraz

$$\frac{\mathrm{d}f(\bar{\boldsymbol{x}} + s\boldsymbol{v})}{\mathrm{d}s} = \bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} - \boldsymbol{v}^T\boldsymbol{b} = \boldsymbol{v}^T\left(\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{b}\right) = 0 \tag{112}$$

Vzhledem k libovolnosti $\boldsymbol{v}$ musí být $\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b}$.

Nechť $\bar{\boldsymbol{x}}$ splňuje rovnici $\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{b}$. Funkci $f(\boldsymbol{x})$ lze psát

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \\ &= \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} + \frac{1}{2}\bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} - \frac{1}{2}\bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} = \\ &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}})^T\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{x}}) - \frac{1}{2}\bar{\boldsymbol{x}}^T\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}} \end{aligned}$$

Protože je matice $\boldsymbol{A}$ pozitivně definitní, minimum $f(\boldsymbol{x})$ nastává pro $\boldsymbol{x} = \bar{\boldsymbol{x}}$ a má velikost $-\frac{1}{2}\bar{\boldsymbol{x}}^T \boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{x}}$.

Gradient kvadratické funkce $f(\boldsymbol{x})$ má tvar

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \frac{\mathrm{d}f(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} \tag{113}$$

a reziduum má tvar

$$\boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = -\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) \tag{114}$$

V numerických metodách se budou používat aproximace $\boldsymbol{x}^{(k)}$ vektoru $\bar{\boldsymbol{x}}$, který minimalizuje funci $f(\boldsymbol{x})$. Chyba je definována

$$\boldsymbol{e}^{(k)} = \bar{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^{(k)} \tag{115}$$

Vztah mezi reziduem a chybou je

$$\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{e}^{(k)} \tag{116}$$

7.1 Metoda největšího spádu

Nechť je dána kvadratická funkce n proměnných ve tvaru

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b} \tag{117}$$

kde $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$ je symetrická pozitivně definitní matice a vektor $\boldsymbol{b} \in R^n$. Hledání minima lze provést metodou největšího spádu, ve které se hledá nejmenší hodnota ve směru gradientu.

Nechť je známa aproximace $\boldsymbol{x}^{(k)}$ polohy extrému $\bar{\boldsymbol{x}}$ v k-tém kroku minimalizace. Nová aproximace se předpokládá ve tvaru

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}\boldsymbol{r}^{(k)}, \tag{118}$$

kde $\boldsymbol{r}^{(k)}$ je vektor rezidua (vektor opačný ke gradientu $\boldsymbol{g}^{(k)}$)

$$\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} = -\boldsymbol{g}^{(k)}. \tag{119}$$

Dosazením $\boldsymbol{x}^{(k+1)}$ do funkce $f(\boldsymbol{x})$ vychází

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) &= \frac{1}{2}(\boldsymbol{x}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha^{(k)}(\boldsymbol{x}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)} + \\ &+ \frac{1}{2}(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)} - (\boldsymbol{x}^{(k)})^T\boldsymbol{b} - \alpha^{(k)}(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{b}, \end{aligned} \tag{120}$$

což je kvadratická funkce jedné proměnné $\alpha^{(k)}$.

Její minimum se určí z podmínky

$$\frac{\mathrm{d}f(\alpha^{(k)})}{\mathrm{d}\alpha^{(k)}} = (\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)}(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)} - (\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{b} = 0, \tag{121}$$

odkud vychází

$$\alpha^{(k)} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{b} - (\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)}}{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{r}^{(k)}}{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}}. \tag{122}$$

Reziduum v $k+1$-ním kroku má tvar

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} - \alpha^{(k)}\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}. \tag{123}$$

Algoritmus metody největšího spádu

volba počáteční aproximace $\boldsymbol{x}_0$

výpočet počátečního rezidua $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$

iterace $k = 0, 1, \ldots$

$$\alpha^{(k)} = \frac{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T \boldsymbol{r}^{(k)}}{(\boldsymbol{r}^{(k)})^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}}$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} + \alpha^{(k)} \boldsymbol{r}^{(k)}$$

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = \boldsymbol{r}^{(k)} - \alpha^{(k)} \boldsymbol{A}\boldsymbol{r}^{(k)}$$

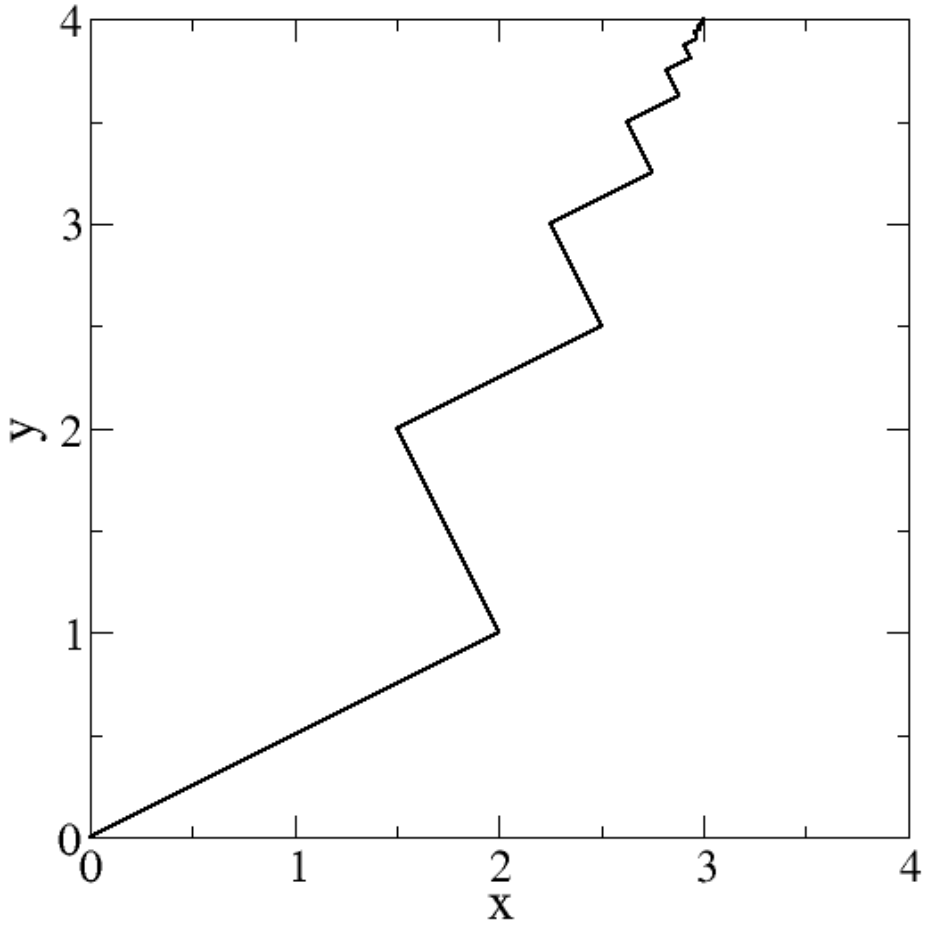
pokud $\|\boldsymbol{r}^{(k+1)}\| > \varepsilon \|\boldsymbol{b}\|$, další krok, jinak konec

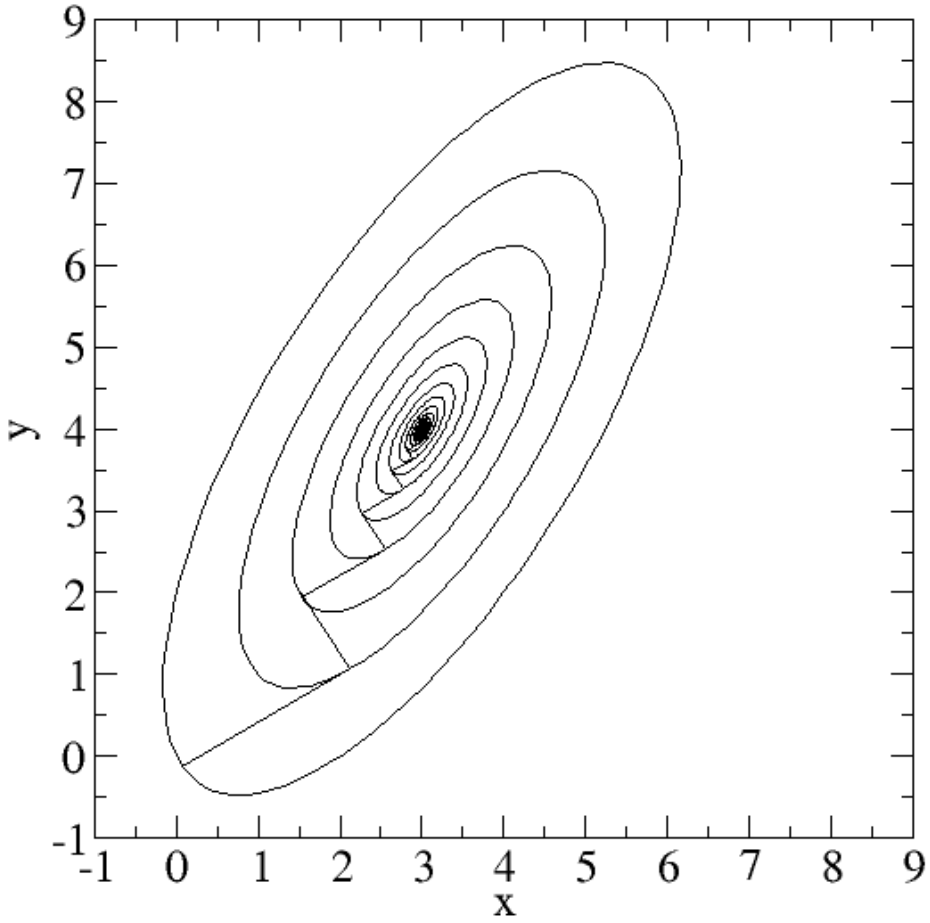
Příklad. Soustava rovnic

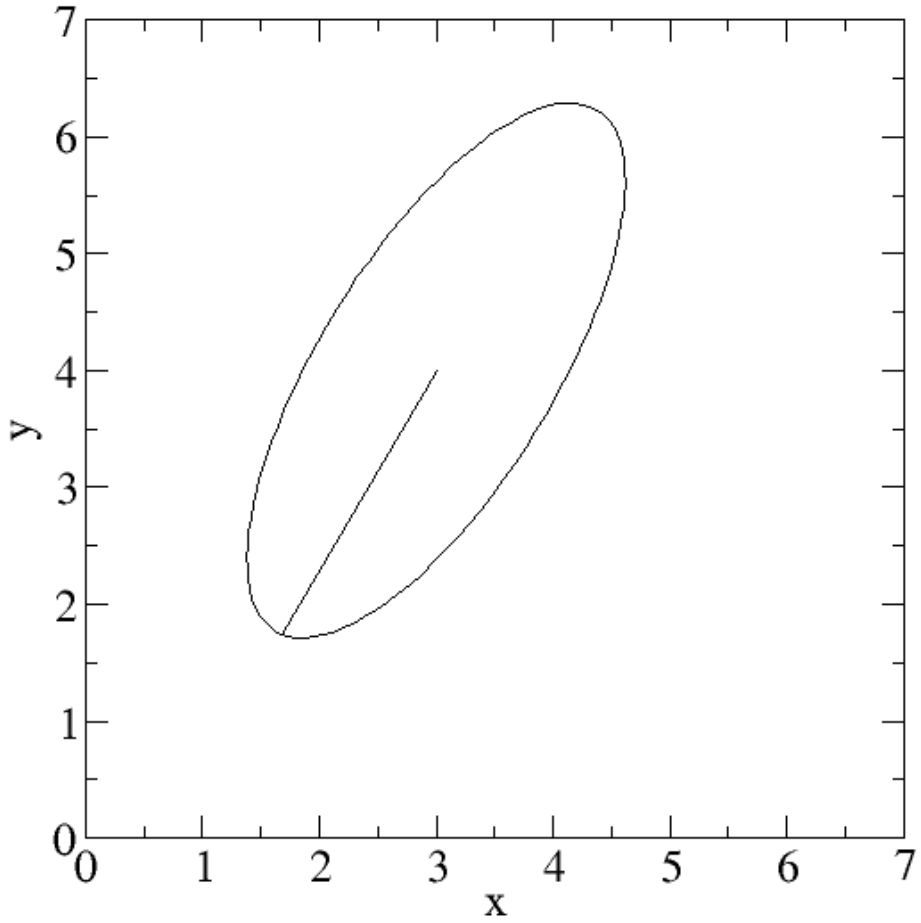
$$\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

má řešení

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$


4
3
2
1
0
y
0
1
2
3
4
x


9
8
7
6
5
4
3
2
1
0
-1
y
-1 0 1 2 3 4 5 6 7 8 9
x


7
6
5
4
3
2
1
0
y
0
1
2
3
4
5
6
7
x

7.2 Metoda sdružených gradientů

Nechť je dána kvadratická funkce n proměnných ve tvaru

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^T\boldsymbol{b}$$

kde $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$ je symetrická pozitivně definitní matice a vektor $\boldsymbol{b} \in R^n$. Hledání minima lze provést metodou sdružených gradientů. Na rozdíl od metody největšího spádu se směr minimalizace nevolí totožný s vektorem rezidua, ale určuje se pomocí dodatečné podmínky.

Vzhledem k významu metody sdružených gradientů bude provedeno poměrně podrobné odvození.

Volí se počáteční aproximace $\boldsymbol{x}_0$ přesného řešení $\bar{\boldsymbol{x}}$. Počáteční reziduum má tvar $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$. Nová aproximace řešení se volí ve tvaru

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{s}_0$$

kde $\boldsymbol{s}_0$ je vektor směru. Počáteční vektor $\boldsymbol{s}_0$ se volí roven vektoru rezidua, tedy $\boldsymbol{s}_0 = \boldsymbol{r}_0$. Dosazením vektoru $\boldsymbol{x}_1$ do kvadratické funkce vychází

$$f(\boldsymbol{x}_1) = \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2 \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{b} - \alpha_0 \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{b}$$

Z podmínky stacionarity plyne

$$\frac{\mathrm{d} f(\boldsymbol{x}_1)}{\mathrm{d}\alpha_0} = \boldsymbol{x}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{b} = 0 \quad \Rightarrow \quad \alpha_0 = \frac{\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0}$$

Pro další úvahy je užitečné vypočítat hodnotu kvadratické funkce pro $\boldsymbol{x}_1$, vychází

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_1) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{b} + \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{b} = \\ &= f(\boldsymbol{x}_0) - \frac{1}{2}\frac{(\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{r}_0)^2}{\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0} \end{aligned}$$

Další aproximace má tvar

$$\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0\boldsymbol{s}_0 + \alpha_1\boldsymbol{s}_1$$

Nyní je vektor $\boldsymbol{s}_1$ neznámý a je třeba ho určit.

Dosazením vektoru $\boldsymbol{x}_2$ do kvadratické funkce vychází

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_2) &= \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \alpha_0\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 - \boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{b} - \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{b} + \\ &+ \alpha_1\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{b} \end{aligned}$$

S uvážením vztahů pro α_0 a $\boldsymbol{r}_0$ a s ohledem na volbu $\boldsymbol{s}_0$ lze předcházející výraz upravit do tvaru

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_2) &= f(\boldsymbol{x}_0) - \frac{1}{2}\frac{(\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{r}_0)^2}{\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0} + \alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{r}_0 \\ &= f(\boldsymbol{x}_1) + \alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{r}_0 \end{aligned}$$

Bude-li zvolen vektor $\boldsymbol{s}_1$ tzv. $\boldsymbol{A}$-ortogonální k vektoru $\boldsymbol{s}_0$, tj. bude-li platit $\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 = 0$, bude mít výraz pro α_1 tvar

$$\alpha_1 = \frac{\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1}$$

Úpravami vycházejí důležité vztahy

$$\boldsymbol{x}_1 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0\boldsymbol{s}_0 \qquad \Rightarrow \qquad \boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0 = \alpha_0\boldsymbol{s}_0$$

proto platí

$$\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{x}_0) = \alpha_0\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 = 0$$

a dále

$$\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1 - \boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{b} - \boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{b} =$$
$$\boldsymbol{s}_1^T(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0) - \boldsymbol{s}_1^T(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1) = \boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{r}_1 = 0$$

Platí tedy důležitý vztah

$$\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_1$$

s jehož pomocí lze přepsat výraz pro α_1 do tvaru

$$\alpha_1 = \frac{\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_1}{\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_1}$$

Další aproximace je ve tvaru

$$\boldsymbol{x}_3 = \boldsymbol{x}_0 + \alpha_0 \boldsymbol{s}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{s}_1 + \alpha_2 \boldsymbol{s}_2$$

Dosazením do kvadratické funkce vychází

$$
\begin{aligned}
& f(\boldsymbol{x}_3) = \\
= \quad & \frac{1}{2}\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_1\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_2\boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 + \\
+ \quad & \frac{1}{2}\alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0^2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_0\alpha_1\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_0\alpha_2\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 + \\
+ \quad & \frac{1}{2}\alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_1\alpha_0\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_1^2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_1\alpha_2\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 + \\
+ \quad & \frac{1}{2}\alpha_2\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_2\alpha_0\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0 + \frac{1}{2}\alpha_2\alpha_1\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1 + \frac{1}{2}\alpha_2^2\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 - \\
- \quad & \boldsymbol{x}_0^T\boldsymbol{b} - \alpha_0\boldsymbol{s}_0^T\boldsymbol{b} - \alpha_1\boldsymbol{s}_1^T\boldsymbol{b} - \alpha_2\boldsymbol{s}_2^T\boldsymbol{b}
\end{aligned}
$$

S ohledem na $\boldsymbol{A}$-ortogonalitu směrových vektorů $\boldsymbol{s}_i$, vztahů pro α_i a definici rezidua platí

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}_3) &= f(\boldsymbol{x}_0) - \frac{(\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{r}_0)^2}{2\boldsymbol{s}_0^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_0} - \frac{(\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{r}_1)^2}{2\boldsymbol{s}_1^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1} + \\ &+ \alpha_2 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 + \frac{1}{2}\alpha_2^2 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2 - \alpha_2 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{b} \end{aligned}$$

odkud vychází

$$\alpha_2 = \frac{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2}$$

Úpravami vycházejí důležité vztahy

$$\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_0 = \alpha_0 \boldsymbol{s}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{s}_1$$

proto platí

$$\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{x}_0) = \alpha_0 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_0 + \alpha_1 \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_1 = 0$$

a dále

$$\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_2 - \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_2 = 0$$

výraz pro α_2 lze proto přepsat do tvaru

$$\alpha_2 = \frac{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{r}_2}{\boldsymbol{s}_2^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_2}$$

Obecně platí

$$\boldsymbol{x}_k = \boldsymbol{x}_0 + \sum_{i=0}^{i=k-1} \alpha_i \boldsymbol{s}_i \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_0 = \sum_{i=0}^{i=k-1} \alpha_i \boldsymbol{s}_i$$

proto

$$\boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_0) = \sum_{i=0}^{i=k-1} \alpha_i \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_i = 0$$

a dále pak

$$\boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_k = 0 \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{r}_k$$

Věta. Nechť je dán vektor $\boldsymbol{x}_0$. Potom pro každé $i < k$ platí $\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_k = 0$.

Důkaz.

$$\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{s}_i^T (\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k) = \boldsymbol{s}_i^T \left(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \sum_{j=0}^{j=k-1} \alpha_j \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_j \right)$$

S ohledem na ortogonalitu směrových vektorů platí

$$\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_k = \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_0 - \alpha_i \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_0 - \frac{\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{r}_0}{\boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i} \boldsymbol{s}_i^T \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i = 0$$

Věta. Platí $\boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{s}_k = \boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{r}_k$

Důkaz. Přenásobením vztahu pro nový směrový vektor

$$\boldsymbol{s}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{s}_k$$

vektorem $\boldsymbol{r}_{k+1}^T$ zleva vychází

$$\boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{s}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{s}_k = \boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{r}_{k+1}$$

protože platí předcházející věta.

volba počáteční aproximace $\boldsymbol{x}_0$

výpočet počátečního rezidua $\boldsymbol{r}_0 = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0$

nastavení počátečního směrového vektoru $\boldsymbol{s}_0 = \boldsymbol{r}_0$

iterace $k = 0, 1, \ldots$

$$\alpha_k = \frac{\boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{r}_k}{\boldsymbol{s}_k^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_k}$$

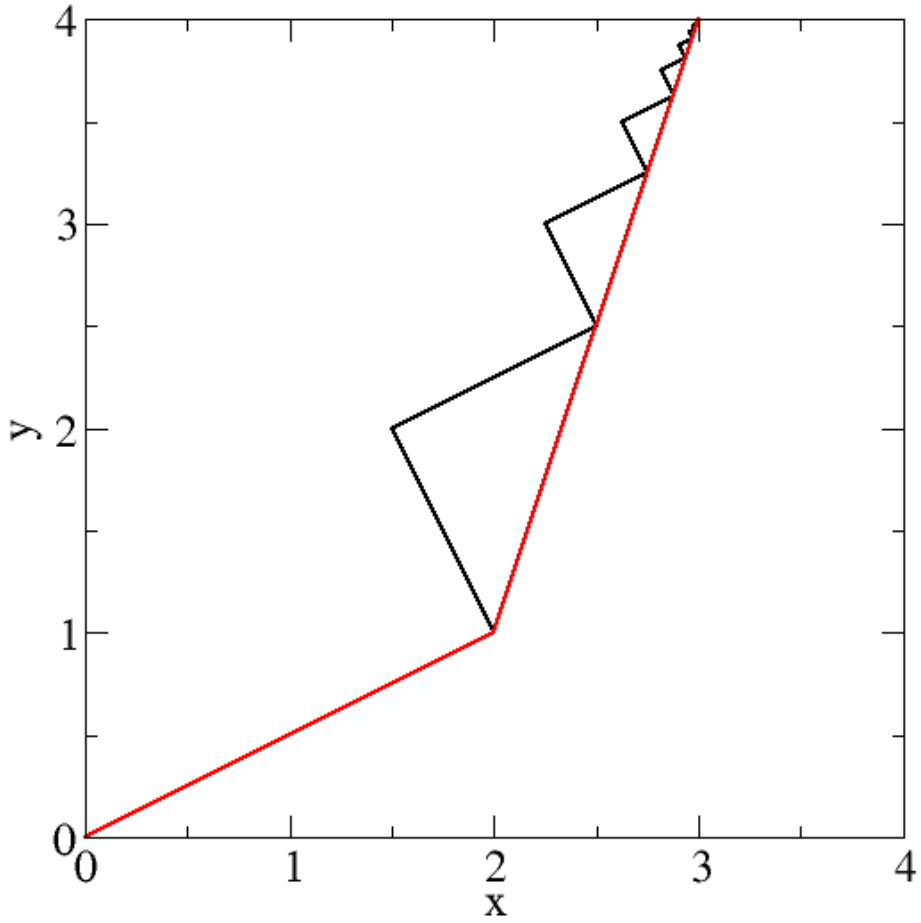
$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{s}_k$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1} = \boldsymbol{r}_k - \alpha_k \boldsymbol{A} \boldsymbol{s}_k$$

pokud $\|\boldsymbol{r}_{k+1}\| < \varepsilon$, konec iterace

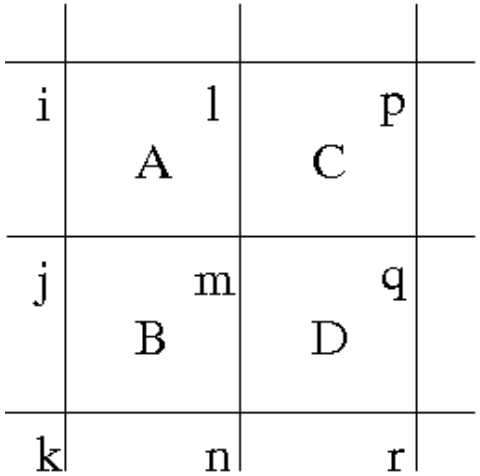
$$\beta_k = \frac{\boldsymbol{r}_{k+1}^T \boldsymbol{r}_{k+1}}{\boldsymbol{r}_k^T \boldsymbol{r}_k}$$

$$\boldsymbol{s}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + \beta_k \boldsymbol{s}_k$$


4
3
2
1
0
y
0
1
2
3
4
x

8 Ukládání matic v paměti počítače

8.1 Soustavy rovnic z MKP



S ohledem na velmi omezený nosič bázových funkcí obsahují matice z MKP extrémně málo nenulových prvků.

úloha	m
2D vedení tepla, čtyřúhelníky	9
rovinná napjatost, čtyřúhelníky	18
3D vedení tepla, šestistěny	27
3D pružnost	81

m je počet nenulových prvků na jednom řádku matice soustavy.

8.2 Typy ukládání

Definice. Matice obsahující alespoň 90% nulových prvků se nazývá řídká.

Definice. Matice, pro kterou platí $\forall i, j, |i - j| \geq p : a_{ij} = 0$, se nazývá pásová s konstantní šířkou pásu p.

Matice soustav lineárních algebraických rovnic získaných z metody konečných prvků, konečných diferencí a konečných objemů jsou obvykle velmi řídké.

- plná matice
- pásová matice (konstantní šířka pásu)
- skyline (proměnná šířka pásu)
- kompresované řádky/sloupce

Při použití pásových matic (s konstantní i proměnnou šířkou pásu) je vhodné přečíslovat neznámé.

Extrémní případ

$$\begin{pmatrix} \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} \\ \mathrm{x} & \mathrm{x} & & & \\ \mathrm{x} & & \mathrm{x} & & \\ \mathrm{x} & & & \mathrm{x} & \\ \mathrm{x} & & & & \mathrm{x} \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} \mathrm{x} & & & & \mathrm{x} \\ & \mathrm{x} & & & \mathrm{x} \\ & & \mathrm{x} & & \mathrm{x} \\ & & & \mathrm{x} & \mathrm{x} \\ \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} & \mathrm{x} \end{pmatrix} \tag{124}$$

$$
\boldsymbol{K} = \begin{pmatrix}
15 & 0 & -4 & 3 & -2 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & -4 & 0 \\
0 & 23 & 3 & -6 & -1 & 4 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -19 \\
-4 & 3 & 15 & 0 & -4 & 0 & -2 & -1 & -4 & -3 & -2 & 1 \\
3 & -6 & 0 & 23 & 0 & -19 & 1 & 4 & -3 & -6 & -1 & 4 \\
-2 & -1 & -4 & 0 & 15 & 0 & -4 & 3 & -2 & 1 & -4 & -3 \\
1 & 4 & 0 & -19 & 0 & 23 & 3 & -6 & -1 & 4 & -3 & -6 \\
0 & 0 & -2 & 1 & -4 & 3 & 7 & -3 & -2 & -1 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 4 & 3 & -6 & -3 & 11 & 1 & -9 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -4 & -3 & -2 & -1 & -2 & 1 & 7 & 3 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -3 & -6 & 1 & 4 & -1 & -9 & 3 & 11 & 0 & 0 \\
-4 & 0 & -2 & -1 & -4 & -3 & 0 & 0 & 0 & 0 & 15 & 0 \\
0 & -19 & 1 & 4 & -3 & -6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 23
\end{pmatrix}
$$

Skyline–proměnná šířka pásu

prvky matice se ukládají do jednorozměrného pole `a`, kromě toho se sestavuje pole adres diagonálních prvků `adr`

ukládají se všechny prvky sloupců od diagonálního prvku až k nejvzdálenějšímu nenulovému mimodiagonálnímu prvku

ukládání skyline se používá v souvislosti s eliminací matice (rozkladem matice na tvar $\boldsymbol{LDL}^T$ nebo $\boldsymbol{LL}^T$)

prvek matice a_{ij} je na pozici `adr[j]+j-i`

např. $a_{24} = -6, i = 1, j = 3$ (indexy v C), `adr[3]=5`, `5+3-1=7`, `a[7]=-6`

pole `a` obsahující prvky matice

15	**23**	**15**	3	-4	**23**	0	-6	3	**15**	0	-4
-1	-2	**23**	0	-19	0	4	1	**7**	3	-4	1
-2	**11**	-3	-6	3	4	-1	**7**	1	-2	-1	-2
-3	-4	**11**	3	-9	-1	4	1	-6	-3	**15**	0
0	0	0	-3	-4	-1	-2	0	-4	**23**	0	0
0	0	0	-6	-3	4	1	-19				

pole `adr` obsahující adresy (indexy) diagonálních prvků

0	1	2	5	9	14	20	25	31	38	46	57	68

Compressed Rows – kompresované řádky

prvky matice jsou uloženy v jednorozměrném poli `a`, pro každý uložený prvek se ukládá jeho sloupcový index do celočíselného pole `ci`, kromě toho se sestavuje celočíselného pole `adr` obsahující adresu (index) prvního prvku v každém řádku

ukládají se jen nenulové prvky, postupuje se po řádcích

ukládání kompresované řádky se používá v souvislosti s iteračními metodami, ve kterých se násobí matice soustavy s nějakým vektorem

a	**15**	-4	3	-2	1	-4	**23**	3	-6	-1	4	-19
ci	1	3	4	5	6	11	2	3	4	5	6	12

a	-4	3	**15**	-4	-2	-1	-4	-3	-2	1	3	-6
ci	1	2	3	5	7	8	9	10	11	12	1	2

a	**23**	-19	1	4	-3	-6	-1	4	-2	-1	-4	**15**
ci	4	6	7	8	9	10	11	12	1	2	3	5

a	-4	3	-2	1	-4	-3	1	4	-19	**23**	3	-6
ci	7	8	9	10	11	12	1	2	4	6	7	8

a	-1	4	-3	-6	-2	1	-4	3	**7**	-3	-2	-1
ci	9	10	11	12	3	4	5	6	7	8	9	10

a	-1	4	3	-6	-3	**11**	1	-9	-4	-3	-2	-1
ci	3	4	5	6	7	8	9	10	3	4	5	6

a	-2	1	**7**	3	-3	-6	1	4	-1	-9	3	**11**
ci	7	8	9	10	3	4	5	6	7	8	9	10

a	-4	-2	-1	-4	-3	**15**	-19	1	4	-3	-6	**23**
ci	1	3	4	5	6	11	2	3	4	5	6	12

adr	0	6	12	22	32	42	52	60	68	76	84	90	96

Symmetric Compressed Rows – symetrické kompresované řádky

používají se stejná pole jako v ukládání kompresované řádky, tedy `a, ci, adr`

ukládání symetrické kompresované řádky se používá pro symetrické matice

ukládají se jen nenulové prvky od začátku řádků až k diagonálním prvkům včetně

ukládání kompresované řádky se používá v souvislosti s iteračními metodami, ve kterých se násobí matice soustavy s nějakým vektorem

a	**15**	**23**	-4	3	**15**	3	-6	**23**	-2	-1
ci	1	2	1	2	3	1	2	4	1	2

a	-4	**15**	1	4	-19	**23**	-2	1	-4	3
ci	3	5	1	2	4	6	3	4	5	6

a	**7**	-1	4	3	-6	-3	**11**	-4	-3	-2
ci	7	3	4	5	6	7	8	3	4	5

a	-1	-2	1	**7**	-3	-6	1	4	-1	-9
ci	6	7	8	9	3	4	5	6	7	8

a	3	**11**	-4	-2	-1	-4	-3	**15**	-19	1
ci	9	10	1	3	4	5	6	11	2	3

a	4	-3	-6	**23**
ci	4	5	6	12

adr	0	1	2	5	8	12	16	21	27	34	42	48	54

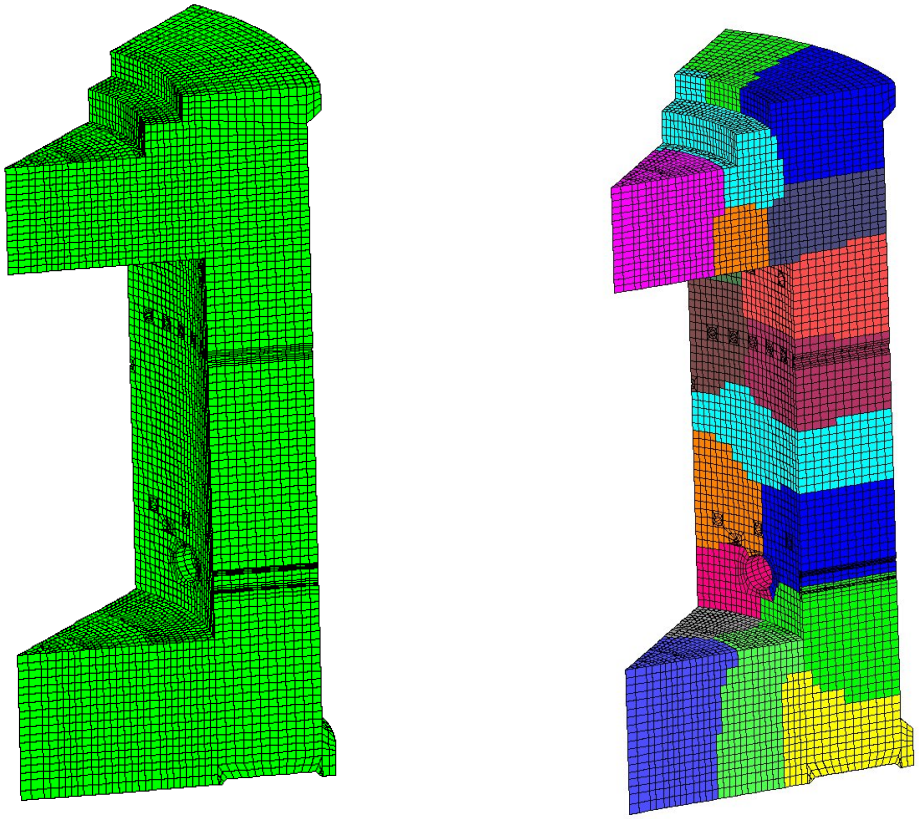
Porovnání způsobů ukládání

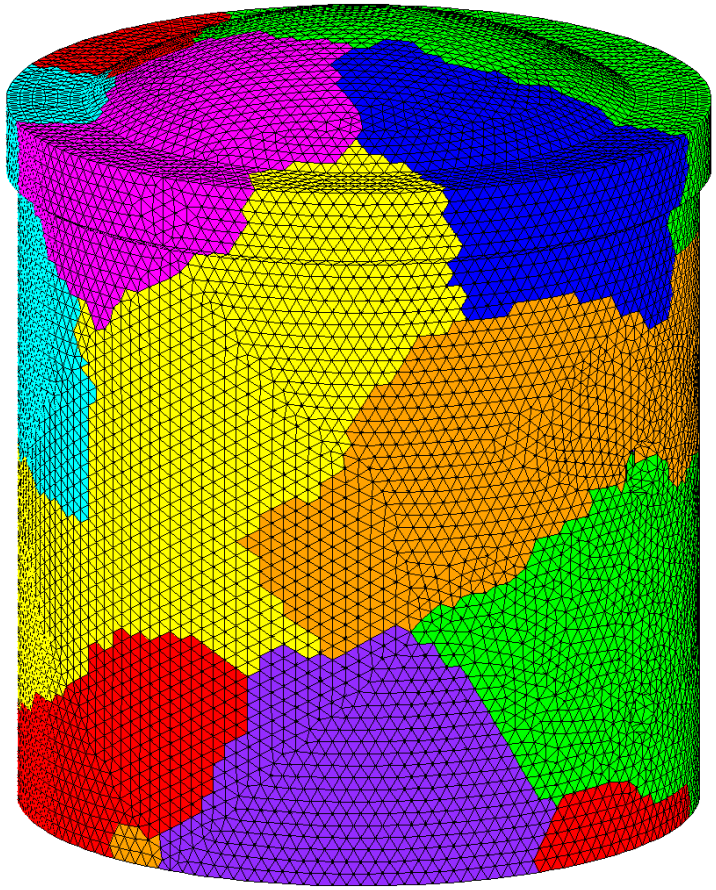
problém	NDOF	š. pásu	skyline	CR	SCR
1D	26,460	18	489,366	952,272	489,366
2D	26,532	405	10,753,938	1,404,144	715,338
3D	26,460	1,323	34,972,371	1,942,362	984,411

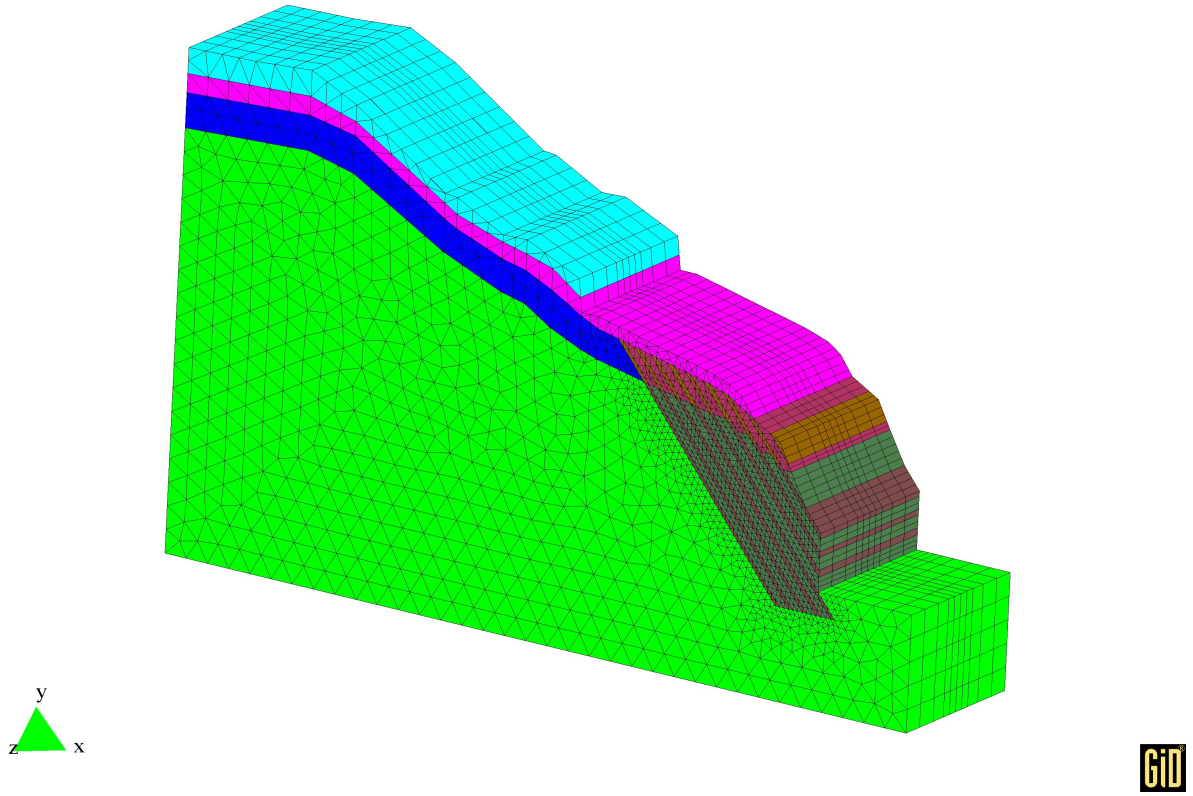
9 Metody rozložení oblasti na podoblasti, výpočty na paralelních počítačích

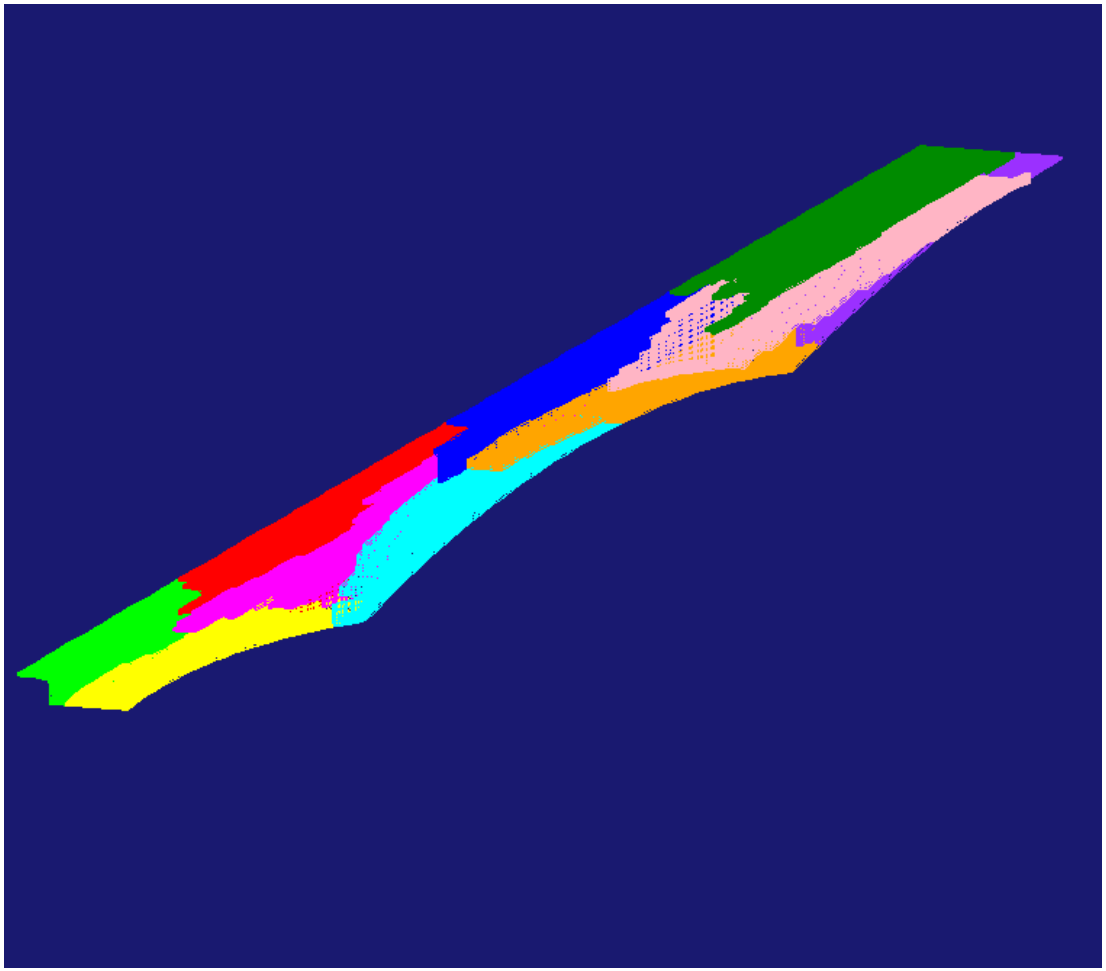
- metody bez překryvu
  - Metoda Schurových doplňků
  - Metoda FETI (Finite Element Tearing and Interconnecting method): existuje mnoho variant, FETI-1, FETI-2, TFETI, HFETI
  - Metoda FETI-DP (Dual-Primal Finite Element Tearing and Interconnecting method)
- metody s překryvem

- Schwarzova aditivní metoda
- Schwarzova multiplikativní metoda






y
z
x
GiD



Metoda Schurových doplňků

Nechť je dána soustava n lineárních algebraických rovnic

$$\boldsymbol{K}\boldsymbol{d} = \boldsymbol{f}, \tag{125}$$

kde $\boldsymbol{K} \in R^{n\times n}$, $\boldsymbol{d} \in R^n$, $\boldsymbol{f} \in R^n$. Dále nechť je soustava rozdělena na bloku ve tvaru

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{K}_{11} & \boldsymbol{K}_{12} \\ \boldsymbol{K}_{21} & \boldsymbol{K}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{d}_1 \\ \boldsymbol{d}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_1 \\ \boldsymbol{f}_2 \end{pmatrix}, \tag{126}$$

kde $\boldsymbol{K}_{11}$ je regulární.

$$\boldsymbol{d}_1 = \boldsymbol{K}_{11}^{-1}\left(\boldsymbol{f}_1 - \boldsymbol{K}_{12}\boldsymbol{d}_2\right) \tag{127}$$

$$\left(\boldsymbol{K}_{22} - \boldsymbol{K}_{21}\boldsymbol{K}_{11}^{-1}\boldsymbol{K}_{12}\right)\boldsymbol{d}_2 = \boldsymbol{f}_2 - \boldsymbol{K}_{21}\boldsymbol{K}_{11}^{-1}\boldsymbol{f}_1 \tag{128}$$

Matice $\left(\boldsymbol{K}_{22} - \boldsymbol{K}_{21}\boldsymbol{K}_{11}^{-1}\boldsymbol{K}_{12}\right)$ se nazývá Schurův doplněk a bývá označena $\boldsymbol{S}$.

Nechť je úloha rozdělena na m částí.

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{K}_1^{[ii]} & & \mathbf{0} & & & \boldsymbol{K}_1^{[ib]} \\ & \boldsymbol{K}_2^{[ii]} & & & & \boldsymbol{K}_2^{[ib]} \\ \mathbf{0} & & \boldsymbol{K}_3^{[ii]} & & & \boldsymbol{K}_3^{[ib]} \\ \vdots & & & \ddots & & \vdots \\ & & & & \boldsymbol{K}_m^{[ii]} & \boldsymbol{K}_m^{[ib]} \\ \boldsymbol{K}_1^{[bi]} & \boldsymbol{K}_2^{[bi]} & \boldsymbol{K}_3^{[bi]} & \dots & \boldsymbol{K}_m^{[bi]} & \boldsymbol{K}^{[bb]} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{d}_1^{[i]} \\ \boldsymbol{d}_2^{[i]} \\ \boldsymbol{d}_3^{[i]} \\ \vdots \\ \boldsymbol{d}_m^{[i]} \\ \boldsymbol{d}^{[b]} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{f}_1^{[i]} \\ \boldsymbol{f}_2^{[i]} \\ \boldsymbol{f}_3^{[i]} \\ \vdots \\ \boldsymbol{f}_m^{[i]} \\ \boldsymbol{f}^{[b]} \end{pmatrix} \tag{129}$$

Označení:

- $\boldsymbol{d}_j^{[i]}$, kde $j \in \{1, 2, \ldots, m\}$, vektory neznámých uvnitř podoblastí,
- $\boldsymbol{d}^{[b]}$ vektor neznámých na hranici podoblastí,
- $\boldsymbol{f}_j^{[i]}$, kde $j \in \{1, 2, \ldots, m\}$, vektory pravé strany obsahující jen složky uvnitř podoblastí,
- $\boldsymbol{f}^{[b]}$ vektory pravé strany obsahující jen složky na hranicích podoblastí.

$$n = n^{[b]} + \sum_{j=1}^{m} n_j^{[i]} \tag{130}$$

Diagonální bloky $\boldsymbol{K}_j^{[ii]} \in R^{n_j^{[i]} \times n_j^{[i]}}$ jsou regulární. Vektory $\boldsymbol{d}_j^{[i]}$ a $\boldsymbol{f}_j^{[i]}$ jsou z $R^{n_j^{[i]}}$, mimodiagonální bloky $\boldsymbol{K}_j^{[ib]}$ jsou z $R^{n_j^{[i]} \times n^{[b]}}$.

$$\boldsymbol{d}_j^{[i]} = \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]}\right)^{-1} \left(\boldsymbol{f}_j^{[i]} - \boldsymbol{K}_j^{[ib]} \boldsymbol{d}^{[b]}\right) \ . \tag{131}$$

$$
\begin{pmatrix}
\boldsymbol{K}_1^{[ii]} & & & \mathbf{0} & & \boldsymbol{K}_1^{[ib]} \\
& \ddots & & & & \vdots \\
& & \boldsymbol{K}_{j-1}^{[ii]} & & & \boldsymbol{K}_{j-1}^{[ib]} \\
\mathbf{0} & & & \boldsymbol{K}_{j+1}^{[ii]} & & \boldsymbol{K}_{j+1}^{[ib]} \\
& & & & \ddots & \vdots \\
& & & & \boldsymbol{K}_m^{[ii]} & \\
\boldsymbol{K}_1^{[bi]} & & & \dots & & \tilde{\boldsymbol{K}}^{[bb]}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
\boldsymbol{d}_1^{[i]} \\ \vdots \\ \boldsymbol{d}_{j-1}^{[i]} \\ \boldsymbol{d}_{j+1}^{[i]} \\ \vdots \\ \boldsymbol{d}_m^{[i]} \\ \boldsymbol{d}^{[b]}
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
\boldsymbol{f}_1^{[i]} \\ \vdots \\ \boldsymbol{f}_{j-1}^{[i]} \\ \boldsymbol{f}_{j+1}^{[i]} \\ \vdots \\ \boldsymbol{f}_m^{[i]} \\ \tilde{\boldsymbol{f}}^{[b]}
\end{pmatrix}
\tag{132}
$$

kde matice $\tilde{\boldsymbol{K}}^{[bb]}$ má tvar

$$\tilde{\boldsymbol{K}}^{[bb]} = \boldsymbol{K}^{[bb]} - \boldsymbol{K}_j^{[bi]} \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]} \right)^{-1} \boldsymbol{K}_j^{[ib]} \tag{133}$$

a vektor $\tilde{\boldsymbol{f}}^{[b]}$ má tvar

$$\tilde{\boldsymbol{f}}^{[b]} = \boldsymbol{f}^{[b]} - \boldsymbol{K}_j^{[bi]} \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]} \right)^{-1} \boldsymbol{f}_j^{[i]} \tag{134}$$

$$\left(\boldsymbol{K}^{[bb]} - \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{K}_j^{[bi]} \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]} \right)^{-1} \boldsymbol{K}_j^{[ib]} \right) \boldsymbol{d}^{[b]} = \boldsymbol{f}^{[b]} - \sum_{j=1}^{m} \boldsymbol{K}_j^{[bi]} \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]} \right)^{-1} \boldsymbol{f}_j^{[i]} \tag{135}$$

$$\boldsymbol{d}_j^{[i]} = \left(\boldsymbol{K}_j^{[ii]} \right)^{-1} \left(\boldsymbol{f}_j^{[i]} - \boldsymbol{K}_j^{[ib]} \boldsymbol{d}^{[b]} \right) \ . \tag{136}$$

10 Soustavy nelineárních rovnic

Porovnání nelineárních a lineárních soustav rovnic

- absence věty o řešitelnosti - obecně neznámý počet řešení
- absence univerzálního algoritmu řešení - neexistuje obdoba Gaussova eliminačního algoritmu

Metody řešení soustav nelineárních rovnic

- metoda půlení intervalu
- metoda sečen
- metoda regula falsi
- metoda prosté iterace
- Newtonova-Raphsonova metoda

10.1 Newtonova-Raphsonova metoda

10.1.1 Jedna funkce jedné proměnné

$$f(x) = 0 \tag{137}$$

$$f\left(x^{(k+1)}\right) \approx f\left(x^{(k)}\right) + \frac{\mathrm{d}f\left(x^{(k)}\right)}{\mathrm{d}x}\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right) = 0 \tag{138}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{\dfrac{\mathrm{d}f\left(x^{(k)}\right)}{\mathrm{d}x}} \tag{139}$$

Příklad - kvadratická funkce jedné proměnné

obecně

$$f(x) = ax^2 + bx + c = 0 \tag{140}$$

$$f'(x) = 2ax + b \tag{141}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{a(x^{(k)})^2 + bx^{(k)} + c}{2ax^{(k)} + b} \tag{142}$$

konkrétní funkce

$$f(x) = x^2 - 11x + 10 = 0 \tag{143}$$

$$f'(x) = 2x - 11 \tag{144}$$

$$f(1) = 0\,, \quad f(10) = 0 \tag{145}$$

k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)})$
0	0.000000000000e+00	1.000000000000e+01
1	9.090909090909e-01	8.264462809917e-01
2	9.990999099910e-01	8.101620243033e-03
3	9.999999100000e-01	8.100000161671e-07
4	1.000000000000e+00	7.993605777301e-15

Příklad - goniometrická funkce

$$f(x) = \sin x \tag{146}$$

$$f'(x) = \cos x \tag{147}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{\sin x^{(k)}}{\cos x^{(k)}} \tag{148}$$

k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)})$
0	8.000000000000e-01	7.173560908995e-01
1	-2.296385570504e-01	-2.276255837975e-01
2	4.123579169748e-03	4.123567483600e-03
3	-2.337247535615e-08	-2.337247535615e-08
4	3.308722450212e-24	3.308722450212e-24

k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)})$
0	2.200000000000e+00	8.084964038196e-01
1	3.573823056769e+00	-4.188971239432e-01
2	3.112499733480e+00	2.908881625187e-02
3	3.141600864433e+00	-8.210843004404e-06
4	3.141592653590e+00	1.224606353822e-16

k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)})$
0	1.700000000000e+00	9.916648104525e-01
1	9.396602139459e+00	2.817209343589e-02
2	9.424785419182e+00	-7.458413052948e-06
3	9.424777960769e+00	3.673819061467e-16

10.1.2 Vektorová funkce mnoha proměnných

$$\boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} \qquad \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} f_1(\boldsymbol{x}) \\ f_2(\boldsymbol{x}) \\ \vdots \\ f_n(\boldsymbol{x}) \end{pmatrix} \tag{149}$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0} \tag{150}$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \approx \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} \left(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right) = \mathbf{0} \tag{151}$$

$$f_i(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \approx f_i(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial f_i(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\partial x_j} \left(x_j^{(k+1)} - x_j^{(k)} \right) \tag{152}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \dfrac{\partial f_n(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_n(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_n(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{pmatrix} \tag{153}$$

$$\boldsymbol{J}^{(k)} = \boldsymbol{J}\big(\boldsymbol{x}^{(k)}\big) \tag{154}$$

$$\boldsymbol{f}^{(k)} = \boldsymbol{f}\big(\boldsymbol{x}^{(k)}\big) \tag{155}$$

$$\boldsymbol{f}^{(k+1)} \approx \boldsymbol{f}^{(k)} + \boldsymbol{J}^{(k)}\left(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right) = \boldsymbol{0} \tag{156}$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \left(\boldsymbol{J}^{(k)}\right)^{-1} \boldsymbol{f}^{(k)} \tag{157}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{1}{\dfrac{\mathrm{d}\,f\big(x^{(k)}\big)}{\mathrm{d}x}} f\big(x^{(k)}\big) \tag{158}$$

Příklad - kvadratická funkce dvou proměnných

vektorová funkce

$$f_x(x,y) = x^2 + 3x - y^2 + 3y - 10 \tag{159}$$

$$f_y(x,y) = -x^2 - 4x + y^2 + y \tag{160}$$

řešení

$$f_x(2,3) = 0 \tag{161}$$

$$f_y(2,3) = 0 \tag{162}$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} x^2 + 3x - y^2 + 3y - 10 \\ -x^2 - 4x + y^2 + y \end{pmatrix} \tag{163}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} 2x+3 & -2y+3 \\ -2x-4 & -2y+1 \end{pmatrix} \tag{164}$$

k	$x^{(k)}$	$y^{(k)}$	$f_x(x^{(k)}, y^{(k)})$	$f_y(x^{(k)}, y^{(k)})$
0	0.000000000000e+00	0.000000000000e+00	-1.000000000000e+01	0.000000000000e+00
1	6.666666666667e-01	2.666666666667e+00	-6.666666666667e+00	6.666666666667e+00
2	2.444444444444e+00	3.111111111111e+00	2.962962962963e+00	-2.962962962963e+00
3	2.026143790850e+00	3.006535947712e+00	1.640394719979e-01	-1.640394719979e-01
4	2.000101726813e+00	3.000025431703e+00	6.358022806019e-04	-6.358022806019e-04
5	2.000000001552e+00	3.000000000388e+00	9.701276229394e-09	-9.701276673484e-09

10.2 Modifikovaná Newtonova-Raphsonova metoda

10.2.1 Jedna funkce jedné proměnné

$$f(x) = 0 \tag{165}$$

$$f\left(x^{(k+1)}\right) \approx f\left(x^{(k)}\right) + \frac{\mathrm{d}f\left(x^{(k)}\right)}{\mathrm{d}x}\left(x^{(k+1)} - x^{(k)}\right) = 0 \tag{166}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{f\left(x^{(k)}\right)}{\frac{\mathrm{d}f\left(x^{(0)}\right)}{\mathrm{d}x}} \tag{167}$$

Příklad - kvadratická funkce jedné proměnné

obecně

$$f(x) = ax^2 + bx + c = 0 \tag{168}$$

$$f'(x) = 2ax + b \tag{169}$$

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - \frac{a(x^{(k)})^2 + bx^{(k)} + c}{2ax^{(0)} + b} \tag{170}$$

konkrétní funkce

$$f(x) = x^2 - 11x + 10 = 0 \tag{171}$$

$$f'(x) = 2x - 11 \quad \Rightarrow \quad f'(x^{(0)}) = 2x^{(0)} - 11 \tag{172}$$

$$f(1) = 0\,, \quad f(10) = 0 \tag{173}$$

k	$x^{(k)}$	$f(x^{(k)})$
0	0.000000000000e+00	1.000000000000e+01
1	9.090909090909e-01	8.264462809917e-01
2	9.842223891811e-01	1.422474303736e-01
3	9.971539737605e-01	2.562233602103e-02
4	9.994832770351e-01	4.650773686545e-03
5	9.999060746430e-01	8.453370350859e-04
6	9.999829234644e-01	1.536891123779e-04
7	9.999968952018e-01	2.794319300995e-05
8	9.999994354921e-01	5.080571226647e-06
9	9.999998973622e-01	9.237399151022e-07
10	9.999999813386e-01	1.679527020949e-07
11	9.999999966070e-01	3.053685505589e-08
12	9.999999993831e-01	5.552155735167e-09

10.2.2 Vektorová funkce mnoha proměnných

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0} \tag{174}$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k+1)}) \approx \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)}) + \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}^{(k)})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}} \left(\boldsymbol{x}^{(k+1)} - \boldsymbol{x}^{(k)}\right) = \boldsymbol{0} \tag{175}$$

$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = \boldsymbol{x}^{(k)} - \left(\boldsymbol{J}^{(0)}\right)^{-1} \boldsymbol{f}^{(k)} \tag{176}$$

Příklad

$$f_x(x,y) = x^2 + 3x - y^2 + 3y - 10 \tag{177}$$

$$f_y(x,y) = -x^2 - 4x + y^2 + y \tag{178}$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \begin{pmatrix} x^2 + 3x - y^2 + 3y - 10 \\ -x^2 - 4x + y^2 + y \end{pmatrix} \tag{179}$$

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{x}^{(0)}) = \begin{pmatrix} 2x^{(0)} + 3 & -2y^{(0)} + 3 \\ -2x^{(0)} - 4 & -2y^{(0)} + 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ -4 & 1 \end{pmatrix} \tag{180}$$

k	$x^{(k)}$	$y^{(k)}$	$f_x(x^{(k)}, y^{(k)})$	$f_y(x^{(k)}, y^{(k)})$
0	0.000000000000e+00	0.000000000000e+00	-1.000000000000e+01	0.000000000000e+00
1	6.666666666667e-01	2.666666666667e+00	-6.666666666667e+00	6.666666666667e+00
2	2.444444444444e+00	3.111111111111e+00	2.962962962963e+00	-2.962962962963e+00
3	1.654320987654e+00	2.913580246914e+00	-2.048468221308e+00	2.048468221308e+00
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
50	2.000000001650e+00	3.000000000413e+00	1.031398611222e-08	-1.031398655631e-08
51	1.999999998900e+00	2.999999999725e+00	-6.875991774222e-09	6.875992218311e-09