

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

Lineáris algebra és mátrixok alkalmazásai

Szakdolgozat

Készítette:

Ruzsányi Orsolya

Matematika BSc, matematikai elemző szakirány

Témavezető:

Fialowski Aliz, egyetemi docens
Algebra és Számelmélet Tanszék



Budapest
2013

Köszönetnyilvánítás

Ezúton szeretném megköszönni Fialowski Aliz tanárnőnek a sok segítséget és inspirációt a szakdolgozatom elkészítéséhez, illetve családomnak a sok türelmet és támogatást, melyet az évek során kaptam tőlük.

Tartalomjegyzék

| | |
|--|----|
| Bevezetés | 4 |
| Első fejezet | 5 |
| Lineáris egyenletrendszerek megoldhatósága | |
| Második fejezet | 7 |
| Direkt megoldási módszerek | |
| 2.1. Gauss-elimináció | 7 |
| 2.2. LU-felbontás | 11 |
| 2.3. Cholesky- felbontás | 14 |
| Harmadik fejezet | 17 |
| Klasszikus iterációs módszerek | |
| 3.1. Jacobi-iteráció | 19 |
| 3.2. Gauss-Seidel iteráció | 21 |
| 3.3. Richardson-iteráció | 23 |
| Negyedik fejezet | 26 |
| Modern iterációs módszerek | |
| 4.1. Legmeredekebb lejtő módszere | 27 |
| 4.2. Csebisev-polinomokat alkalmazó iteráció | 30 |
| Ötödik fejezet | 34 |
| Azonos példán a módszerek bemutatása | |
| Összegzés | 39 |
| Irodalomjegyzék | 41 |

Bevezetés

A lineáris algebra és a mátrixok alkalmazási területe igen széles a természettudományok körében. Találkozhatunk vele kémia reakciók felírása során, mechanikai folyamatok vizsgálatakor, gazdasági feladatok megoldása közben illetve akár a mindennapi élet során logisztikai problémák esetén.

Ezen felsorolt területek esetén a lineáris algebrai egyenletrendszerek felírása és megoldása nyújt nagy segítséget a problémák megértéséhez és megoldásához. Ez a problémakör magában foglalja a mátrixok alkalmazását is, hiszen minden egyes egyenletrendszer felírható mátrixokkal való műveletek segítségével.

Szakedolgozatomban olyan általam kiválasztott ma is használatos megoldási módszereket mutatok be, melyek segítségével pontos, illetve közelítő megoldást kaphatunk az éppen adott feladatra.

A direkt módszerek és numerikus módszerek esetén is igen fontos szerepet kap az informatika, hiszen számítógép segítségével olyan nagy méretű, sok ismeretlenes egyenletrendszerek is megoldhatók, amelyek régebben nehézséget okoztak a matematikusoknak. Ennek megfelelően a számítógép fejlődésével párhuzamosan vált egyre jobban kutatott területté a lineáris algebra ezen ága. Dolgozatomban az általunk tanult módszerek mellett olyan modern algoritmusokat is bemutatok, melyeket a nagy sebességű számítógépek megjelenése után dolgoztak ki, köszönhetően a mátrixműveletek elvégzésére kifejlesztett nagyon gyors eljárásoknak.

Első fejezet

A lineáris egyenletrendszerek megoldhatósága

Mielőtt a megoldhatóság feltételéről szót ejtenénk, definiáljuk a lineáris egyenletrendszerek általános alakját. Egy n ismeretlenes m egyenletet tartalmazó egyenletrendszer felírható a következő alakban:

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

ahol a_{ij} és b_i tetszőleges szám ($i=1, 2, \dots, m; j=1, 2, \dots, n$), és keressük azokat az x_j számokat, amelyekre igazak a fent felírt feltételek.

Más formában is megadható, úgynevezett mátrixos alakban, amely egyszerűbbé teszi mind az elméleti kérdések vizsgálatát, mind pedig a számítógépes megoldási módszerek alkalmazását. Ehhez be kell vezetni az A ún. együtthatómátrixot :

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \ddots & \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}$$

Ekkor az egyenletrendszer a következő rövidített formában írható fel:

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

ahol \mathbf{b} egy m -elemű oszlopvektor, ami az egyenletrendszer jobb oldalát tartalmazza.

Az \mathbf{x} egy n -elemű oszlopvektor, az ún. megoldásvektor, ami a feladatban szereplő ismeretleneket foglalja magában.

Most térjünk rá a megoldhatóság kérdésére. Egy lineáris egyenletrendszer megoldhatóság szempontjából többféle lehet. Lehet, hogy egyértelműen megoldható (vagyis pontosan egy megoldása van), lehet hogy több megoldása is létezik (ez a valós számokon értelmezett egyenletrendszer esetén végtelen sok megoldást jelent) illetve előfordulhat az is, hogy egyáltalán nincs megoldása. A következő tétel pontos feltételt ad a megoldhatóság kérdésére.

Tétel (/1/ Freud, 1998)

Az $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$ egyenletrendszer akkor és csak akkor oldható meg, ha $r(A) = r(A|\mathbf{b})$, azaz az együtthatómátrix rangja megegyezik a kibővített mátrix rangjával. Megoldhatóság esetén a megoldás akkor és csak akkor egyértelmű, ha a (közös) rang megegyezik az ismeretlenek számával.

A megoldási módszereink esetén itt csak olyan egyenletrendszerekkel foglalkozunk, amelyek mátrixa négyzetes és valós, illetve pontosan csak egy megoldása létezik. Ebben az esetben a tétel állításánál már kevesebb is elegendő a szükséges és elégséges feltételhez. Ha az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix determinánsa nullától különböző, akkor egyértelmű a megoldás.

Ekkor az egyenletrendszer megoldása $\mathbf{x} = A^{-1}\mathbf{b}$, mivel a feltétel szerint az A mátrixnak létezik inverze.

Második fejezet

Direkt megoldási módszerek

A megoldási módszereket két nagy csoportba lehet osztani. Először a direkt módszerek közül fogok néhányat ismertetni. Ezen módszerek esetén véges sok aritmetikai művelet segítségével állítjuk elő a megoldásokat. Ha lépésenként pontosan számolunk, akkor pontosan kapjuk meg az egyenletrendszer megoldását is. A direkt módszerek „kézzel” történő kiszámítása kisebb egyenletrendszerek esetén praktikus csak, több egyenletet tartalmazó egyenletrendszer esetén már inkább valamilyen számítógépes program segítségét érdemes igénybe venni.

2.1. Gauss-módszer

Az egyik legegyszerűbb és leggyakrabban használt direkt megoldási módszer a Gauss-módszer. Első lépésként aritmetikai műveletek segítségével szisztematikusan átalakítjuk az egyenletrendszert oly módon, hogy lépésenként redukáljuk az ismeretlenek számát az egyenletekben. Ekkor a végén egy olyan új egyenletrendszert kapunk, amelynek az utolsó egyenlete csak az utolsó ismeretlent tartalmazza, még az utolsó előtti csak az utolsó két ismeretlent és így tovább. Ekkor az együtthatómátrix ún. felső háromszögmátrix alakúvá alakul át a műveletek hatására, vagyis a főátló alatti összes elem nulla. Második lépésként visszahelyettesítés segítségével megkaphatjuk a megoldásokat visszafelé haladva az egyenletek sorozatán.

Az eljárás során a következő lépések végezhetők az egyenletekkel:

1. Valamelyik egyenletet egy nullától különböző valós skalárral végigszorozhatjuk.
2. Valamelyik egyenlethez egy másik egyenlet skalárszorosát hozzáadhatjuk.
3. Két egyenletet felcserélhetünk.
4. Olyan egyenleteket, amelyben minden együttható és az egyenlet jobboldali konstansa nulla, elhagyhatjuk.

Ezen lépések sorozataként kapjuk majd meg a már említett alakú új egyenletrendszert. Természetesen az általunk vizsgált egyenletrendszerek esetén a negyedik lépés nem fordulhat elő, hiszen csak egyértelmű megoldással rendelkezőket szeretnénk megoldani, amelyeknek az együtthatómátrixa négyzetes, és ebben az esetben nem volna a megoldás egyértelmű.

Először egy példán keresztül tekintsük át a Gauss-módszer lépéseit. Oldjuk meg a következő egyenletrendszert: (/2/ *Numerical Linear Algebra*)

$$\begin{aligned} 2x + 4y - 4z + t &= 0 \\ 3x + 6y + z - 2t &= -7 \\ -x + y + 2z + 3t &= 4 \\ x + y - 4z + t &= 2 \end{aligned}$$

Írjuk át mátrixos alakba:

$$\begin{pmatrix} 2 & 4 & -4 & 1 \\ 3 & 6 & 1 & -2 \\ -1 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 1 & -4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \\ t \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -7 \\ 4 \\ 2 \end{pmatrix}$$

A kibővített együtthatómátrix segítségével a következő módon hajtható végre a Gauss-elimináció:

$$\begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & -4 & 1 & 0 \\ 3 & 6 & 1 & -2 & -7 \\ -1 & 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 1 & -4 & 1 & 2 \end{array} \rightarrow \begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 7 & -7/2 & -7 \\ 0 & 3 & 0 & 7/2 & 4 \\ 0 & -1 & -2 & 1/2 & 2 \end{array}$$

Első lépésként kivontuk az első sor $3/2$ -szeresét a második sorból, az első sor

$-1/2$ -szeresét a harmadik sorból, illetve az első sor $1/2$ -szeresét az utolsó sorból. Így az első oszlop főátló alatti elemeit mind kinulláztuk.

$$\rightarrow \begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 7/2 & 4 \\ 0 & 0 & 7 & -7/2 & -7 \\ 0 & -1 & -2 & 1/2 & 2 \end{array} \rightarrow \begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 7/2 & 4 \\ 0 & 0 & 7 & -7/2 & -7 \\ 0 & 0 & -2 & 5/3 & 10/3 \end{array} \rightarrow$$

Második lépésként egy sorcserét hajtottunk végre a második és a harmadik sor között.

Majd ezt követően kivontuk a második sor $-1/3$ -szorosát az utolsó sorból, minek eredményeképpen a második oszlop főátló alatti elemi is csupa nulla lett.

$$\rightarrow \begin{array}{cccc|c} 2 & 4 & -4 & 1 & 0 \\ 0 & 3 & 0 & 7/2 & 4 \\ 0 & 0 & 7 & -7/2 & -7 \\ 0 & 0 & 0 & 2/3 & 4/3 \end{array}$$

Még végül kivontuk a harmadik sor $-2/7$ -szeresét a negyedik sorból. Így megkaptuk az együtthatómátrix felső háromszög alakját, amiből visszahelyettesítéssel már könnyen megkapható a megoldás:

$$\mathbf{t=2, z=0, y=-1, x=1 .}$$

Most nézzük meg általánosan a Gauss-módszer lépéseit:

Első lépésként az első egyenlet segítségével kiejtjük az első oszlop többi elemét, azáltal, hogy kivonjuk az első sor szám szorosát minden egyes alatta lévő sorból. Ezáltal kapunk egy olyan mátrixot, amelynek az első oszlopa csupa nulla, kivéve a legfelső tagot. Majd pedig következő lépésként vesszük a második sort és ennek skalárszorosát kivonva az alatta lévő egyenletekből szintén kinullázzuk a második oszlop főátló alatti minden elemét. Ezt az algoritmust folytatva utoljára az utolsó sor utolsó előtti elemét tesszük nullával egyenlővé úgy, hogy kivonjuk az utolsó előtti sor számszorosát az utolsó sorból. Ezek után visszafelé haladva az egyenleteken elsőként megkapjuk az x_n értékét, majd pedig ezt behelyettesítve az utolsó előtti

egyenletbe kiszámolhatjuk az x_{n-1} értékét. Ezt a módszert alkalmazva megkapható az összes ismeretlen az egyenletrendszerből.

Előfordulhat, hogy az éppen aktuális egyenletünk megfelelő oszlopbeli főátló eleme kinullázódik, mint a példánkban is látható volt, ekkor sorcserét követően folytatható volt az algoritmus. Ez egy számítógépes programozás során problémát okozhat az algoritmus folytatásában, ennek elkerülésére alkalmazhatjuk a következő tételt:

Tétel: (*/3/ Faragó-Horváth, 2011*)

A Gauss-módszer pontosan akkor hajtható végre, ha az A mátrix egyik főminorja sem zérus, azaz $\det(A(1:k, 1:k)) \neq 0$ ($k=1, \dots, n$).

Bizonyítás: Egy mátrix determinánusa nem változik, ha a mátrix soraiból kivonjuk egy másik sor skalárszorosát. Vagyis a Gauss-elimináció során végzett lépések nem változtatják meg az A mátrix főminorjait sem. Ezek a főminorok a lépések során a következőféleképpen állnak elő.

$$\begin{aligned} \det(A(1:1, 1:1)) &= a_{11}^{(1)} \neq 0 \\ \det(A(1:2, 1:2)) &= \det(A^{(2)}(1:2, 1:2)) = a_{11}^{(1)} \cdot a_{22}^{(2)} \neq 0 \\ &\vdots \\ \det(A(1:n, 1:n)) &= \det(A^{(n)}(1:n, 1:n)) = a_{11}^{(1)} \cdot a_{22}^{(2)} \cdot \dots \cdot a_{nn}^{(n)} \neq 0, \end{aligned}$$

ahol az $A^{(1)}$ a kezdeti együtthatómátrixot jelenti, míg az $A^{(2)}$ az első lépés után kapott módosult együtthatómátrixot jelöli és így tovább. Teljesen hasonlóan $a_{ij}^{(k)}$ a k -ik együtthatómátrix i -ik sorának j -ik elemét adja.

Ebből már következik a tétel állítása. \square

2.2. LU-felbontás

A következő direkt módszer, amelyet ismertetni fogok, az LU-felbontás. Ezt a módszert lineáris egyenletrendszerek megoldása mellett mátrixok determinánsának és inverzének a kiszámolására is lehet alkalmazni. A módszer nevében szereplő U mátrix egy felső háromszögmátrixot jelöl, még L egy alsó háromszögmátrixot, amelynek főátlójában csupa egyes szerepel.

Tétel: (/3/ Faragó-Horvát, 2011)

Tegyük fel, hogy az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrixra $\det(A(1:k, 1:k)) \neq 0$ ($k=1, \dots, n-1$), azaz a Gauss-elimináció végrehajtható vele. Ekkor létezik egy olyan L normált (főátlóban egyesek szerepelnek) alsó (lower) háromszögmátrix és egy U felső (upper) háromszögmátrix, melyekkel $A=LU$. Ha egy reguláris mátrixnak létezik LU-felbontása, akkor az LU-felbontása egyértelmű.

Megjegyzésként elmondható, hogy az U mátrix a Gauss-elimináció során kapott felső háromszögmátrixszal egyezik meg, míg az L mátrix a Gauss- módszer során alkalmazott skalárszorzők segítségével állítható elő, ahol l_{ij} az i . sor j . elemének kinullázásához használt szorzó.

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & \dots & 0 \\ \vdots & & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Először most is vegyünk egy példát. Állítsuk elő a következő mátrix LU-felbontását.

(/2/ Numerical Linear Algebra)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -9 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 3 \end{pmatrix}$$

Végezzük el a Gauss-eliminációt, és közben jegyezzük fel az l_{ij} értékeket.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 6 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -9 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 3 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & -2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -9 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 3 \end{pmatrix}, \text{ és}$$

$$l_{21} = \frac{2}{1} = 2$$

$$l_{31} = \frac{0}{1} = 0$$

$$l_{41} = \frac{0}{1} = 0$$

$$l_{51} = \frac{0}{1} = 0$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -9 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 3 \end{pmatrix}, \text{ és}$$

$$l_{32} = \frac{2}{2} = 1$$

$$l_{42} = \frac{0}{2} = 0$$

$$l_{52} = \frac{0}{2} = 0$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & -4 & 3 \end{pmatrix}, \text{ és}$$

$$l_{43} = \frac{-9}{-3} = 3$$

$$l_{53} = \frac{0}{-3} = 0$$

$$\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}, \text{ és}$$

$$l_{54} = \frac{-4}{4} = -1$$

$$\text{Vagyis } \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} \text{ és } \mathbf{U} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -3 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \end{pmatrix}.$$

Elmondható tehát, hogy az LU-felbontás könnyedén elvégezhető a Gauss-módszer segítségével, hiszen a kapott felső háromszögmátrix megegyezik az \mathbf{U} mátrixszal, míg az elimináció során használt l_{ij} értékek felhasználásával megadható az \mathbf{L} alsó háromszögmátrix is.

Más módszerek is léteznek a felbontás elkészítésére, melyek segítségével ugyanezt az eredményt kapnánk meg, hiszen a tétel állítása alapján, ha létezik egy reguláris mátrixnak LU-felbontása, akkor az egyértelmű.

Bizonyítás:

Indirekt fogjuk bizonyítani, tegyük fel, hogy létezik kétféle felbontása:

$$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U} = \tilde{\mathbf{L}}\tilde{\mathbf{U}} \quad \text{Ekkor átrendezve kapjuk: } \tilde{\mathbf{L}}^{-1}\mathbf{L} = \tilde{\mathbf{U}}\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{E}$$

Mivel normált alsó háromszögmátrixok szorzata normált alsó háromszögmátrix, és felső háromszögmátrixoké felső háromszögmátrix, ezért e kettő csak abban az esetben egyezhet csak meg, ha ez az egységmátrix. Ez ellentmond a feltételünknek.

Ezzel az egyértelműséget bebizonyítottuk. \square

Lineáris egyenletrendszerek megoldása esetén a következőféleképpen tudjuk az LU-felbontást alkalmazni. Az $\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$ helyett először az $\mathbf{L}\mathbf{y}=\mathbf{b}$ egyenletrendszert kell megoldanunk, ahonnan megkapjuk \mathbf{y} -t. Ezek után pedig megoldjuk az $\mathbf{U}\mathbf{x}=\mathbf{y}$ egyenletrendszert, amiből már a keresett \mathbf{x} adódik. Ezen egyenletrendszerek megoldása lényegesen egyszerűbb az eredetinel az \mathbf{L} és \mathbf{U} mátrixok tulajdonságaiból adódóan.

2.3. Cholesky-felbontás

Az utolsó direkt módszer amivel megismerkedünk a Cholesky- felbontás, amely csak speciális mátrixok esetén alkalmazható. Ha az A mátrix szimmetrikus, pozitív definit mátrix, akkor létezik Cholesky-felbontása. Ennél gyengébb feltételeket igénylő felbontás az LDL^T felbontás, amely már szimmetrikus mátrixok esetén is előállítható.

Tétel (/3/ Faragó-Horvát, 2011)

Szimmetrikus $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix esetén egyértelműen létezik egy L normált alsó háromszögmátrix és egy D diagonális mátrix, melyekkel $A = LDL^T$.

Tétel (/3/ Faragó-Horvát, 2011)

Tegyük fel, hogy A egy szimmetrikus, pozitív definit mátrix. Ekkor létezik pontosan egy olyan pozitív diagonálisú G alsó háromszögmátrix, mellyel $A = GG^T$.

Bizonyítás:

Az előző tétel alapján tudjuk, hogy az A mátrix egyértelműen felírható LDL^T alakban, amiben szereplő D diagonális mátrix csak pozitív elemeket tartalmaz a főátlóban, hiszen az A mátrix a feltétel alapján pozitív definit. Ekkor G -t válasszuk a következő módon $G = L \cdot \text{diag}(\sqrt{d_{11}}, \dots, \sqrt{d_{nn}})$. Ez egy pozitív főátlójú alsó háromszögmátrix, amire teljesül $GG^T = A$. \square

Ennek a felbontásnak a meghatározására is többféle módszer létezik. Tekintsük először azt, amely csak a tétel állításában szereplő mátrix tulajdonságait használja ki.

Vegyük a következő mátrixot : (/2/ *Numerical Linear Algebra*)

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 13 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 3 & 9 \end{pmatrix}$$

Készítsük el a Cholesky-féle felbontását, ha tudjuk a következőt:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 & 2 \\ 2 & 13 & 2 & 4 \\ 1 & 2 & 2 & 3 \\ 2 & 4 & 3 & 9 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 & 0 \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & 0 \\ g_{41} & g_{42} & g_{43} & g_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & g_{41} \\ 0 & g_{22} & g_{32} & g_{42} \\ 0 & 0 & g_{33} & g_{43} \\ 0 & 0 & 0 & g_{44} \end{pmatrix}$$

Ekkor a mátrixszorzás alapján felírhatók a következő kifejezések, amelyek alapján az ismeretlenek kiszámíthatók. Soronként fogunk haladni az A mátrixon.

Első sor alapján:

$$\begin{aligned} g_{11}^2 &= 1 \Rightarrow g_{11} = 1 \\ g_{11} g_{21} &= 2 \Rightarrow g_{21} = 2 \\ g_{11} g_{31} &= 1 \Rightarrow g_{31} = 1 \\ g_{11} g_{41} &= 2 \Rightarrow g_{41} = 2 \end{aligned}$$

Második sor alapján:

$$\begin{aligned} g_{21}^2 + g_{22}^2 &= 13 \Rightarrow g_{22} = 3 \\ g_{31} g_{21} + g_{32} g_{22} &= 2 \Rightarrow g_{32} = 0 \\ g_{41} g_{21} + g_{42} g_{22} &= 4 \Rightarrow g_{42} = 0 \end{aligned}$$

Harmadik sor alapján:

$$\begin{aligned} g_{31}^2 + g_{32}^2 + g_{33}^2 &= 2 \Rightarrow g_{33} = 1 \\ g_{41} g_{31} + g_{42} g_{32} + g_{43} g_{33} &= 3 \Rightarrow g_{43} = 1 \end{aligned}$$

Utolsó sor alapján:

$$g_{41}^2 + g_{42}^2 + g_{43}^2 + g_{44}^2 = 9 \Rightarrow g_{44} = 2$$

A kapott adatok alapján felírható a következő \mathbf{G} mátrix, ami teljesíti a feltételeket:

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 3 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Ezen módszeren kívül a tétel bizonyításában szereplő ötlet segítségével is meghatározható a Cholesky- felbontás a következő módon: készítsük el a mátrix $\mathbf{L} \mathbf{D} \mathbf{L}^T$ felbontását, amely segítségével \mathbf{G} már meghatározható a következő módon $\mathbf{G} = \mathbf{L} \cdot \text{diag}(\sqrt{d_{11}}, \dots, \sqrt{d_{nn}})$.

A lineáris egyenletrendszerek megoldása tehát szimmetrikus, pozitív definit mátrixok esetén ezen felbontás segítségével is meghatározható, hiszen az itt megkapott \mathbf{G} mátrix esetén egyszerűsödik a megoldás menete.

Harmadik fejezet

Klasszikus iteratív megoldási módszerek

Most rátérünk a megoldási módszerek másik nagy csoportjára, az iteratív megoldási módszerekre. A két módszer között a fő különbség a következő. Míg a direkt módszereink esetén a pontos megoldásokat kaptuk meg (ha nem terheltük az átalakítások közben számolási hibával), addig az iteratív módszerek esetén a pontos megoldásokat csak közelíteni fogjuk egy konvergens sorozat konstruálása segítségével. Itt is mindig feltételezzük, hogy az együtthatómátrix négyzetes és valós, illetve a determinánsa nem egyenlő nullával. Lineáris egyenletrendszerek lévén lineáris iterációs módszereket fogunk használni, amelynek általános alakja a következőképpen írható fel:

$$\underline{x}^{(k+1)} = \mathbf{B} \underline{x}^{(k)} + \underline{f} \quad k=0,1, \dots,$$

melyben az $\{\underline{x}^{(k)}\}$ sorozat határértéke az egyenletrendszer pontos megoldása (\underline{x}^*). Többféle dolgot kell jól megválasztanunk egy iterációs módszer esetén: az $\underline{x}^{(0)}$ kezdővektort, a \mathbf{B} mátrixot és az \underline{f} vektort. Ezenkívül értelemszerűen adódik még a következő két kérdés: mikor konvergál a sorozatunk a megoldáshoz és mikor álljunk le az iterációval. Különböző módszerek összehasonlításánál ezenkívül fontos szerepet játszik a konvergencia sebessége is, hiszen természetesen szívesebben használunk egy gyorsabb megoldást adó módszert.

Definíció: (*/3/ Faragó-Horvát, 2011*)

Az $\underline{x}^{(k+1)} = \mathbf{B} \underline{x}^{(k)} + \underline{f}$ iterációt az $A\underline{x} = b$ egyenletrendszerrel konzisztensnek hívjuk, ha $\underline{x}^* = \mathbf{B} \underline{x}^* + \underline{f}$. (Az \underline{x}^* vektor az egyenletrendszer megoldása.)

A konvergencia teljesítéséhez a következő feltételt kell az iterációnak teljesíteni.

Tétel: (/3/ Faragó-Horvát, 2011)

Egy, az $A \mathbf{x} = \mathbf{b}$ egyenletrendszerrel konzisztens lineáris iteráció pontosan akkor tart az egyenletrendszer megoldásához tetszőleges kezdővektor esetén, ha $\rho(\mathbf{B}) < 1$.

Bizonyítás:

Legyen $\underline{\mathbf{e}}^{(k)} = \underline{\mathbf{x}}^{(k)} - \underline{\mathbf{x}}^*$ az ún. hibavektor. Azt szeretnénk belátni a konvergenciához, hogy a hibavektor nullához tart. Írjuk fel az $\underline{\mathbf{e}}^{(k+1)}$ hibavektort.

$$\underline{\mathbf{e}}^{(k+1)} = \underline{\mathbf{x}}^{(k+1)} - \underline{\mathbf{x}}^* = \mathbf{B} \underline{\mathbf{x}}^{(k)} + \underline{\mathbf{f}} - (\mathbf{B} \underline{\mathbf{x}}^* + \underline{\mathbf{f}}) = \mathbf{B} (\underline{\mathbf{x}}^{(k)} - \underline{\mathbf{x}}^*) = \mathbf{B} \underline{\mathbf{e}}^{(k)} .$$

Ezt a gondolatmenetet folytatva felírható a következő összefüggés: $\underline{\mathbf{e}}^{(k)} = \mathbf{B}^k \underline{\mathbf{e}}^{(0)}$.

Vagyis a konvergenciához az szükséges, hogy a \mathbf{B}^k a nullmátrixhoz tartson, amihez elegendő ha $\rho(\mathbf{B}) < 1$. \square

A bizonyítás következményeképpen a konvergenciák gyorsaságának kérdésére is megadható a válasz, mert minél kisebb a \mathbf{B} mátrix spektrálsugara, annál gyorsabb az iteráció konvergenciája.

Végezetül térjünk rá az utolsó, eddig meg nem válaszolt kérdésre, mi legyen a \mathbf{B} mátrix és mi az $\underline{\mathbf{f}}$ vektor. Állítsuk elő az együtthatómátrixot a következő alakban:

$A = S - T$, ahol S egy reguláris mátrix. Ekkor a következő módon változik a lineáris egyenletrendszerünk: $\underline{\mathbf{b}} = A \underline{\mathbf{x}} = (S - T) \underline{\mathbf{x}}$. Szorozzuk meg ezt az egyenletet balról az S inverzével, majd fejezzük ki belőle $\underline{\mathbf{x}}$ -et. $\underline{\mathbf{x}} = S^{-1} T \underline{\mathbf{x}} + S^{-1} \underline{\mathbf{b}}$

Emiatt a következő iteráció konzisztens az egyenletrendszerünkkel:

$$\underline{\mathbf{x}}^{(k+1)} = S^{-1} T \underline{\mathbf{x}}^{(k)} + S^{-1} \underline{\mathbf{b}}, \text{ ahol } \mathbf{B} = S^{-1} T \text{ és } \underline{\mathbf{f}} = S^{-1} \underline{\mathbf{b}} .$$

Az S mátrixot prekondicionálási mátrixnak hívjuk, ami meghatározza az iteráció végrehajtásának nehézségét.

Elsőként ismerkedjünk meg két olyan iterációval, amelynél az A mátrixot felbontjuk a következőféleképpen: $A = D - L - U$, ahol D a diagonális elemek, L a diagonális alatti elemek -1-szereseinek, U a diagonális feletti elemek -1-szereseinek mátrixa.

3.1. Jacobi-iteráció

Az S és T mátrixot válasszuk meg a következő módon: $S=D$, illetve $T=U+L$.

Ekkor az $\underline{x}^{(k+1)}=D^{-1}(L+U)\underline{x}^{(k)}+D^{-1}\underline{b}$ iterációt Jacobi-iterációnak nevezzük, a $B_J=D^{-1}(L+U)$ mátrixot pedig a Jacobi-iteráció iterációs mátrixának. Feladatok esetén könnyebben alkalmazható a Jacobi-iteráció vektorkomponensenként kiírt felírása.

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

Nézzünk egy példát az iteráció alkalmazására. (/4/ Bozsik- Krebsz, 2010)

Legyen $A = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 2 \\ -1 & 1 & -1 \\ -2 & -2 & 1 \end{pmatrix}$ és $\underline{b} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$. Vizsgáljuk meg, hogy megoldható-e a

lineáris egyenletrendszer Jacobi-iterációval. Ehhez első lépésben fel kell írni az iterációs mátrixot.

$$B_J = D^{-1}(L+U) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 0 & 2 & -2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & -2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

Meg kell határoznunk a B_J mátrix spektrálsugarát, amelyhez a mátrix sajátértékeire lesz szükségünk.

$$\det(B_J - \lambda I) = \begin{vmatrix} -\lambda & 2 & -2 \\ 1 & -\lambda & 1 \\ 2 & 2 & -\lambda \end{vmatrix} = -\lambda \begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 2 & -\lambda \end{vmatrix} - 2 \begin{vmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -\lambda \end{vmatrix} - 2 \begin{vmatrix} 1 & -\lambda \\ 2 & 2 \end{vmatrix} =$$

$$-\lambda(\lambda^2 - 2) - 2(-\lambda - 2) - 2(2 + 2\lambda) = -\lambda^3 = 0 \Rightarrow \lambda_{1,2,3} = 0$$

$$\rho(B_J) = \max |\lambda| = 0 < 1$$

Ebből következik, hogy bármely $\underline{x}^{(0)}$ kezdővektor esetén konvergens az iteráció,

vagyis megoldható Jacobi-iterációval. Tegyük meg 4 lépést az iterációval.

Válasszuk kezdővektornak az $\underline{x}^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T = \underline{0}$ vektort, illetve számoljuk ki a $\underline{D}^{-1} \cdot \underline{b} = \underline{v}$ vektort, amire szükségünk lesz az iteráció lépéseinél.

$$\underline{v} = \underline{D}^{-1} \cdot \underline{b} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$1. \text{ lépés: } \underline{x}^{(1)} = \underline{B}_J \cdot \underline{x}^{(0)} + \underline{v} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

$$2. \text{ lépés: } \underline{x}^{(2)} = \underline{B}_J \cdot \underline{x}^{(1)} + \underline{v} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & -2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2 \\ 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{bmatrix}$$

$$3. \text{ lépés: } \underline{x}^{(3)} = \underline{B}_J \cdot \underline{x}^{(2)} + \underline{v} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & -2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ 6 \\ 8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix}$$

$$4. \text{ lépés: } \underline{x}^{(4)} = \underline{B}_J \cdot \underline{x}^{(3)} + \underline{v} = \begin{bmatrix} 0 & 2 & -2 \\ 1 & 0 & 1 \\ 2 & 2 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -3 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -4 \\ 6 \\ 8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 7 \\ 9 \end{bmatrix}$$

Mint látható, a 3. lépéstől kezdve az iteráció ugyanazt a vektort adja. Ennek oka, hogy az $\underline{x}^{(3)} = [-3 \ 7 \ 9]^T$ vektor megegyezik az egyenletrendszer megoldásával. Általánosan elmondható, hogy ha a spektrálsugár nullával egyenlő, akkor az iteráció véges, legfeljebb n lépésben konvergál.

3.2. Gauss-Seidel iteráció

Válasszuk most meg másként az S és T mátrixot. Legyen $S=D-L$ és $T=U$. Ekkor a következő iterációt Gauss-Seidel iterációnak nevezzük.

$\underline{x}^{(k+1)}=(D-L)^{-1}U\underline{x}^{(k)}+(D-L)^{-1}\underline{b}$, ahol a $B_{GS}=(D-L)^{-1}U$ a Gauss-Seidel iteráció iterációs mátrixa.

Itt is megadható az iteráció komponensenként felírt alakja:

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

Erre a módszerre is nézzünk egy példát. (/4/ Bozsik- Krebsz, 2010)

Legyen $A=\begin{bmatrix} 5 & 3 & 1 \\ 2 & 5 & -2 \\ 3 & 1 & -2 \end{bmatrix}$ és $\underline{b}=\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$. Itt is azzal fogjuk kezdeni, hogy

megvizsgáljuk, megoldható-e az egyenletrendszer Gauss-Seidel iterációval.

Írjuk fel az iterációs mátrixot:

$$\begin{aligned} B_{GS} &= (D-L)^{-1} \cdot U = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 0 \\ 3 & 1 & -2 \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -3 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} 1/5 & 0 & 0 \\ -2/25 & 1/5 & 0 \\ 13/50 & 1/10 & -1/2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 0 & -3 & -1 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -3/5 & -1/5 \\ 0 & 6/25 & 12/25 \\ 0 & -39/50 & -3/50 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

Alkalmazzuk az iteráció konvergenciájának eldöntésére a következő elégséges feltételt megfogalmazó tételt.

Tétel:

Ha valamely illeszkedő mátrixnormában az iteráció mátrixára $\|B\|<1$, akkor bármely kezdővektorból indítva az iterációt, konvergens lesz az iterációs sorozat.

Mivel $\|B_{GS}\|_{\infty} = \frac{21}{25} < 1$, ezért a tétel alapján bármely kezdővektor esetén a Gauss-Seidel iteráció konvergens. Legyen megint $\underline{x}^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T = \underline{0}$. Most is számítsuk ki a $(D-L)^{-1}b = \underline{v}$ vektort, amire minden lépés esetén szükségünk lesz.

$$\underline{v} = (D-L)^{-1}b = \begin{bmatrix} 1/5 & 0 & 0 \\ -2/25 & 1/5 & 0 \\ 13/50 & 1/10 & -1/2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/5 \\ 3/25 \\ -7/50 \end{bmatrix}$$

Tegyük meg két lépést a Gauss-Seidel iterációval.

$$1. \text{ lépés: } \underline{x}^{(1)} = B_{GS} \cdot \underline{x}^{(0)} + \underline{v} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/5 \\ 3/25 \\ -7/50 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1/5 \\ 3/25 \\ -7/50 \end{bmatrix}$$

2. lépés:

$$\underline{x}^{(2)} = B_{GS} \cdot \underline{x}^{(1)} + \underline{v} = \begin{bmatrix} 0 & -3/5 & -1/5 \\ 0 & 6/25 & 12/25 \\ 0 & -39/50 & -3/50 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} 1/5 \\ 3/25 \\ -7/50 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1/5 \\ 3/25 \\ -7/50 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 39/250 \\ 51/625 \\ -563/2500 \end{bmatrix}$$

Vizsgáljuk meg, kb. hány lépést kell megtennünk a 10^{-3} pontosság eléréséhez.

Ehhez fel kell írni a hibabecslés számolására használható képletet:

$$\|\underline{x}^{(k)} - \underline{x}^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|\underline{x}^{(1)} - \underline{x}^{(0)}\|, \text{ ahol } q = \|B\| \text{ a kontrakciós együttható, amely a}$$

kontrakció hibabecslése, hiszen az iteráció $\|B\| < 1$ esetén, bármely normában felírva, egy kontrakció.

$$q = \frac{21}{25} \text{ esetén } \|\underline{x}^{(k)} - \underline{x}^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|\underline{x}^{(1)} - \underline{x}^{(0)}\| < 10^{-3}$$

$$\frac{\left(\frac{21}{25}\right)^k}{1 - \frac{21}{25}} \cdot \left\| \begin{bmatrix} \frac{1}{5} \\ \frac{3}{25} \\ -\frac{7}{50} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_{\infty} \leq 10^{-3}$$

$$\frac{\left(\frac{21}{25}\right)^k \cdot \frac{1}{5}}{\frac{4}{25}} = \left(\frac{21}{25}\right)^k \cdot \frac{5}{4} \leq 10^{-3}$$

$$\frac{5}{4} \cdot 10^3 \leq \left(\frac{25}{21}\right)^k \Rightarrow \frac{\log(1250)}{\log\left(\frac{25}{21}\right)} \approx 40,90 \leq k$$

Vagyis legalább 41 lépést kell megtennünk az iterációval ahhoz, hogy ezred pontosságú közelítést kapjunk a lineáris egyenletrendszer megoldásához.

3.3. Richardson-iteráció

Következő iterációs módszerünk kissé különbözik az eddig felírt módszerektől, mivel az iterációs mátrix felírásakor nem használjuk az A mátrix eddigi $A = D - L - U$ felbontását. Ez a módszer a következőféleképpen írható le. Tegyük fel, hogy az A mátrix szimmetrikus és pozitív definit, illetve $p \in \mathbb{R}, p \neq 0$. Szorozzuk a lineáris egyenletrendszerünket p -vel.

$$A \mathbf{x} = \mathbf{b} \rightarrow p A \mathbf{x} = p \mathbf{b}$$

Rendezzük nullára, majd pedig adjunk hozzá x -t.

$$0 = -p A \mathbf{x} + p \mathbf{b} \rightarrow \mathbf{x} = (I - p A) \mathbf{x} + p \mathbf{b}$$

Innen a Richardson- iteráció felírása: $\mathbf{x}^{(k+1)} = (I - p A) \mathbf{x}^{(k)} + p \mathbf{b}$,

ahol az iterációs mátrix: $\mathbf{B}_R(p) = I - p A$

Tudjuk, hogy szimmetrikus mátrixok sajátértékei valósak és a pozitív definittség miatt minden $\lambda_i(A) > 0$. Tegyük fel, hogy $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n > 0$. Ekkor az iteráció konvergenciájáról a következő mondható el.

Tétel: (/6/ Alkalmazott analízis jegyzet)

Legyen A szimmetrikus, pozitív definit mátrix. Ekkor az

$\underline{x}^{(k+1)} = (I - pA)\underline{x}^{(k)} + p\underline{b}$ iteráció $p \in \left(0; \frac{2}{\lambda_1}\right)$ esetén tetszőleges kezdővektor mellett konvergens.

A módszer optimális paramétere, melyre a leggyorsabb a konvergencia,

$$p_{opt} = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}. \text{ Az átmenetmátrix spektrálsugara } \rho(\mathbf{B}(p_{opt})) = \frac{\lambda_1 - \lambda_n}{\lambda_1 + \lambda_n}.$$

Nézzünk itt is egy példát az alkalmazására. (/4/ Bozsik- Krebsz, 2010)

Adott az A együtthatómátrix és a \mathbf{b} vektor. Határozzuk meg az optimális paraméter értékét, illetve tegyünk meg 3 lépést vele.

Adott $A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}$ és $\mathbf{b} = \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \\ 3 \end{bmatrix}$. Először számoljuk ki az A mátrix sajátértékeit.

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} 4 - \lambda & 1 & 0 \\ 1 & 4 - \lambda & 1 \\ 0 & 1 & 4 - \lambda \end{vmatrix} = (4 - \lambda)((4 - \lambda)^2 - 1) + (-1) \cdot (4 - \lambda) = 0$$

$$(4 - \lambda)((4 - \lambda)^2 - 2) = (4 - \lambda)(4 - \lambda - \sqrt{2})(4 - \lambda + \sqrt{2}) = 0$$

$$\text{Tehát a sajátértékek: } \lambda_1 = 4, \lambda_2 = 4 - \sqrt{2}, \lambda_3 = 4 + \sqrt{2}.$$

Vagyis a tétel alapján az iteráció a $p \in \left(0; \frac{2}{4 + \sqrt{2}}\right)$ paraméterek esetén bármely

kezdővektorra konvergens. Az optimális paraméter $p_{opt} = \frac{2}{4 + \sqrt{2} + 4 - \sqrt{2}} = \frac{1}{4}$.

Mivel az optimális paraméter benne van a $\left(0; \frac{2}{4 + \sqrt{2}}\right)$ intervallumban, ezért tetszőleges kezdővektor esetén konvergens lesz az iteráció. Válasszuk kezdővektornak az $\underline{x}^{(0)} = [0 \ 0 \ 0]^T = \underline{0}$ vektort.

Itt is érdemes előre kiszámolni a $\underline{\mathbf{v}} = p \cdot \underline{\mathbf{b}} = \frac{1}{4} \cdot \begin{bmatrix} 3 \\ -2 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 3/4 \end{bmatrix}$ vektort, illetve a

$$\mathbf{B}_R(p_{opt}) = \mathbf{I} - p_{opt} \cdot \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{4} \cdot \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & 0 \\ -1/4 & 0 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & 0 \end{bmatrix} \text{ mátrixot.}$$

$$1. \text{ lépés: } \underline{\mathbf{x}}^{(1)} = \mathbf{B}_R(p_{opt}) \cdot \underline{\mathbf{x}}^{(0)} + \underline{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 3/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 3/4 \end{bmatrix}$$

$$2. \text{ lépés: } \underline{\mathbf{x}}^{(2)} = \mathbf{B}_R(p_{opt}) \cdot \underline{\mathbf{x}}^{(1)} + \underline{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & 0 \\ -1/4 & 0 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 3/4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 3/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7/8 \\ -7/8 \\ 7/8 \end{bmatrix}$$

3. lépés:

$$\underline{\mathbf{x}}^{(3)} = \mathbf{B}_R(p_{opt}) \cdot \underline{\mathbf{x}}^{(2)} + \underline{\mathbf{v}} = \begin{bmatrix} 0 & -1/4 & 0 \\ -1/4 & 0 & -1/4 \\ 0 & -1/4 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 7/8 \\ -7/8 \\ 7/8 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 3/4 \\ -1/2 \\ 3/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 31/32 \\ -15/16 \\ 31/32 \end{bmatrix}.$$

A lineáris egyenletrendszer megoldása ismeretében ($\underline{\mathbf{x}} = [1 \ -1 \ 1]^T$) látható, hogy viszonylag jó közelítést kapunk már 3 lépésben.

Egyetlen kérdés maradt megválaszolatlanul a fejezet elején felvetett kérdések közül, hogy mikor érdemes leállni az iterációval. Lehetséges ötletek erre:

1. Ha $\|\mathbf{B}\| < 1$ valamilyen normában felírva, akkor a Banach-féle fixponttétel

alapján $\|\underline{\mathbf{x}}^{(k)} - \underline{\mathbf{x}}^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|\underline{\mathbf{x}}^{(1)} - \underline{\mathbf{x}}^{(0)}\|$, ahol $q = \|\mathbf{B}\|$ a kontrakciós együttható.

Vagyis az első lépés után megállapítható, hogy hány lépést kell megtenni az iterációval ahhoz, hogy közelítőleg megkapjuk az egyenletrendszer megoldását.

2. Az előzőhöz hasonlóan előre megadhatunk egy tetszőleges lépésszámot is, amennyit maximálisan meg akarunk tenni az iterációval. Ez főleg a programozási módszerek esetén fontos, hogy le is álljon biztosan egy idő után az iteráció.

3. Az egymás utáni iterációs eredmények segítségével is megfogalmazhatunk egy leállási kritériumot: ha $\|\underline{\mathbf{x}}^{(k+1)} - \underline{\mathbf{x}}^{(k)}\|$ elegendően kicsi, akkor leállunk az iterációval.

Negyedik fejezet

Modern iterációs módszerek

Amint a bevezetésben már említettem, a nagy sebességű számítógépek megjelenésével párhuzamosan a lineáris egyenletrendszerek megoldási formáinak kutatása is új lendületet kapott. A következő módszerek ezen nagy sebességű számítógépek által váltak megoldhatóvá azáltal, hogy az alapvető mátrixműveletekre nagyon gyors algoritmusokat sikerült kidolgozni.

Mielőtt rátérnénk a módszerek ismertetésére, néhány definíciót adok meg, amelyekre az algoritmusok ismertetésénél szükségünk lesz. Most is olyan egyenletrendszereket vizsgáljuk, amelyeknek pontosan egy megoldása létezik. Az együtthatómátrixról most is feltesszük, hogy négyzetes, valós, szimmetrikus és ezenkívül pozitív definit.

Definíció:

Az $\underline{x}^{(n)}$ eltérését az \underline{x} megoldástól az n -edik lépés hibájának nevezzük és $\underline{e}^{(n)}$ -el jelöljük, vagyis $\underline{e}^{(n)} = \underline{x}^{(n)} - \underline{x}$.

Definíció:

Azt a mennyiséget, amely miatt az n -edik approximáció nem elégíti ki az $A\underline{x} = \underline{b}$ egyenletet, az n -edik reziduálisnak nevezzük és $\underline{r}^{(n)}$ -el jelöljük, vagyis $\underline{r}^{(n)} = A\underline{x}^{(n)} - \underline{b}$.

A két fogalom közötti kapcsolat így írható fel: $\underline{r}^{(n)} = A\underline{e}^{(n)}$.

Mivel általában nem ismerjük az egyenletrendszer megoldását, ezért az n -edik lépés hibáját nem tudjuk közvetlenül kiszámolni, de ha az $\underline{x}^{(n)}$ értékét kiszámoltuk már, akkor az $\underline{r}^{(n)}$ segítségével már kiszámolható a hiba is.

4.1. Legmeredekebb lejtő módszere

A legelső iteratív módszer, amellyel a modern módszerek közül megismerkedünk, a legmeredekebb lejtő módszere, ami az $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ egyenlet variációs karakterizációján alapszik, feltételezve az együtthatómátrix pozitív definittségét. A módszer elsődlegesen a következő észrevételen alapszik.

Tétel: (/5/ Lax, 2008)

Az $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ egyenlet \mathbf{x} megoldása minimalizálja az $E(\mathbf{y})=\frac{1}{2}(\mathbf{y}, A\mathbf{y})-(\mathbf{y}, \mathbf{b})$ funkcionált, ahol (\cdot, \cdot) a vektorok euklideszi skalárszorzatát jelöli.

Bizonyítás:

Jelölje $F(\mathbf{y})$ a következő összefüggést : $F(\mathbf{y})=E(\mathbf{y})+\frac{1}{2}(\mathbf{x}, \mathbf{b})$, ahol az $E(\mathbf{y})$ funkcionálhoz egy konstanszt adtunk hozzá, ami független az y változótól. Helyettesítsük be az $E(\mathbf{y})$ funkcionálra felírt képletet ebbe a formulába, majd felhasználva az A mátrix szimmetriáját és az $A\mathbf{x}=\mathbf{b}$ összefüggést, alakítsuk át a következő alakra: $F(\mathbf{y})=\frac{1}{2}(\mathbf{y}, A\mathbf{y})-(\mathbf{y}, \mathbf{b})+\frac{1}{2}(\mathbf{x}, \mathbf{b})=\frac{1}{2}(\mathbf{y}-\mathbf{x}, A(\mathbf{y}-\mathbf{x}))$.

Nyilván $F(\mathbf{x})=0$, illetve $F(\mathbf{y})>0$ ha $\mathbf{y}\neq\mathbf{x}$, mivel az A mátrixra teljesül (a pozitivitása miatt), hogy bármely $\mathbf{v}\neq 0$ vektor esetén $(\mathbf{v}, A\mathbf{v})>0$. Vagyis innen adódik, hogy az $F(\mathbf{y})$ és ezáltal az $E(\mathbf{y})$ is az $\mathbf{y}=\mathbf{x}$ pontban veszi fel a minimum értékét. \square

A tétel alapján megkaphatjuk a lineáris egyenletrendszerünk megoldását az E minimalizálásával, amit a legmeredekebb lejtő módszerével fogunk megtenni. Ez azt jelenti, hogy az y pontból E negatív gradiense mentén elmozdulva keressük majd az

újabb és újabb pontokat a megoldáshoz.

Az E gradiense a következő alakban írható : $\text{grad } E(\underline{\mathbf{y}}) = \mathbf{A} \underline{\mathbf{y}} - \underline{\mathbf{b}}$.

Az iteráció felírása a következő:

$$\underline{\mathbf{x}}^{(n+1)} = \underline{\mathbf{x}}^{(n)} - s(\mathbf{A} \underline{\mathbf{x}}^{(n)} - \underline{\mathbf{b}}), \text{ ahol } s \text{ a megtett lépés hossza.}$$

Ez a reziduális fogalmának segítségével a következő módon írható át:

$$\underline{\mathbf{x}}^{(n+1)} = \underline{\mathbf{x}}^{(n)} - s \underline{\mathbf{r}}^{(n)}$$

Szeretnénk az s értékét úgy meghatározni, hogy az $E(\underline{\mathbf{x}}^{(n+1)})$ értéke a lehető legkisebb legyen. Írjuk fel az $E(\underline{\mathbf{x}}^{(n+1)})$ függvényt.

$$\begin{aligned} E(\underline{\mathbf{x}}^{(n+1)}) &= \frac{1}{2} (\underline{\mathbf{x}}^{(n)} - s \underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \mathbf{A} (\underline{\mathbf{x}}^{(n)} - s \underline{\mathbf{r}}^{(n)})) - (\underline{\mathbf{x}}^{(n)} - s \underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \underline{\mathbf{b}}) = \\ &= E(\underline{\mathbf{x}}^{(n)}) - s (\underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \underline{\mathbf{r}}^{(n)}) + \frac{1}{2} s^2 (\underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \mathbf{A} \underline{\mathbf{r}}^{(n)}) \end{aligned}$$

Ez a minimumát az $s^{(n)} = \frac{(\underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \underline{\mathbf{r}}^{(n)})}{(\underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \mathbf{A} \underline{\mathbf{r}}^{(n)})}$ pontban veszi fel.

Tétel: (/5/ Lax, 2008)

Az $\underline{\mathbf{x}}^{(n+1)} = \underline{\mathbf{x}}^{(n)} - s(\mathbf{A} \underline{\mathbf{x}}^{(n)} - \underline{\mathbf{b}})$ approximációsorozat az $s^{(n)} = \frac{(\underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \underline{\mathbf{r}}^{(n)})}{(\underline{\mathbf{r}}^{(n)}, \mathbf{A} \underline{\mathbf{r}}^{(n)})}$ érték

mellett konvergál az $\mathbf{A} \underline{\mathbf{x}} = \underline{\mathbf{b}}$ egyenlet megoldásához.

Bizonyítás:

A tételben szereplő $s^{(n)}$ érték nem más, mint az $\underline{\mathbf{r}}$ vektorral felírt \mathbf{A} mátrix Rayleigh- hányadosának a reciproka. A Rayleigh- hányadosról tudjuk, hogy az \mathbf{A} legkisebb és legnagyobb sajátértékei között helyezkedik el, ezeket most jelöljük α -val és β -val. Ezek alapján felírható, hogy

$$\frac{1}{\beta} \leq s^{(n)} \leq \frac{1}{\alpha}, \text{ illetve } \frac{1}{\beta} \leq \frac{(\underline{\mathbf{r}}, \mathbf{A}^{-1} \underline{\mathbf{r}})}{(\underline{\mathbf{r}}, \underline{\mathbf{r}})} \leq \frac{1}{\alpha}, \text{ minden } \underline{\mathbf{r}} \text{ esetén.}$$

Szeretnénk bizonyítani, hogy $n \rightarrow \infty$ esetén $F(\underline{\mathbf{x}}^{(n)})$ nullához tart, mivel ebből már következne, hogy az $\underline{\mathbf{x}}^{(n)}$ a megoldásvektorhoz tart. Írjuk fel az $F(\underline{\mathbf{x}}^{(n)})$ képletét a korábbiaknak megfelelően, és alakítsuk át a korábban felírt hibavektor

($\underline{e}^{(n)} = \underline{x}^{(n)} - \underline{x}$) és a reziduálissal való kapcsolata alapján ($\underline{r}^{(n)} = \underline{A} \underline{e}^{(n)}$):

$$F(\underline{x}^{(n)}) = \frac{1}{2} (\underline{x}^{(n)} - \underline{x}, \underline{A}(\underline{x}^{(n)} - \underline{x})) = \frac{1}{2} (\underline{e}^{(n)}, \underline{A} \underline{e}^{(n)}) = \frac{1}{2} (\underline{e}^{(n)}, \underline{r}^{(n)}) = \frac{1}{2} (\underline{r}^{(n)}, \underline{A}^{-1} \underline{r}^{(n)})$$

Mivel az E és F közötti különbség konstans, ezért a korábban E -re felírt függvény

segítségével F is felírható a következő alakban, felhasználva az $s^{(n)} = \frac{(\underline{r}^{(n)}, \underline{r}^{(n)})}{(\underline{r}^{(n)}, \underline{A} \underline{r}^{(n)})}$

kifejezést.

$$F(\underline{x}^{(n+1)}) = F(\underline{x}^{(n)}) - s(\underline{r}^{(n)}, \underline{r}^{(n)}) + \frac{1}{2} s^2(\underline{r}^{(n)}, \underline{A} \underline{r}^{(n)}) = F(\underline{x}^{(n)}) - \frac{s^{(n)}}{2} (\underline{r}^{(n)}, \underline{r}^{(n)}) .$$

Ez átfogalmazható a korábban felírt $F(\underline{x}^{(n)}) = \frac{1}{2} (\underline{r}^{(n)}, \underline{A}^{-1} \underline{r}^{(n)})$ összefüggés alapján :

$$F(\underline{x}^{(n+1)}) = F(\underline{x}^{(n)}) \left[1 - s^{(n)} \frac{(\underline{r}^{(n)}, \underline{r}^{(n)})}{(\underline{r}^{(n)}, \underline{A}^{-1} \underline{r}^{(n)})} \right]$$

Használjuk fel a sajátértékek alapján felírt becsléseket. Az $F(\underline{x}^{(n+1)})$ felülről a következő módon becsülhető:

$$F(\underline{x}^{(n+1)}) \leq \left(1 - \frac{\alpha}{\beta} \right) F(\underline{x}^{(n)}) .$$

Pozitív, önadjungált mátrixok kondíciószáma felírható a sajátértékek segítségével a

következő hányados segítségével $\kappa(\underline{A}) = \frac{\beta}{\alpha}$. Ezt felhasználva, és az előző

egyenlőtlenséget rekurzívan alkalmazva nyerjük az alábbi becslést:

$$F(\underline{x}^{(n)}) \leq \left(1 - \frac{1}{\kappa} \right)^n F(\underline{x}^{(0)})$$

Alsó korlátnak felírható a Rayleigh-hányados α alsó korlátja, és az

$$F(\underline{x}^{(n)}) = \frac{1}{2} (\underline{r}^{(n)}, \underline{A}^{-1} \underline{r}^{(n)})$$
 összefüggés alapján

$$\frac{\alpha}{2} \|\underline{e}^{(n)}\|^2 \leq F(\underline{x}^{(n)}) .$$

A két becslést együttesen felírva és kissé átrendezve láthatjuk, hogy az $\underline{e}^{(n)}$ hiba nullához tart , amivel a tétel állítását bebizonyítottuk.

$$\|\underline{e}^{(n)}\|^2 \leq \frac{2}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\kappa}\right)^n F(\underline{x}^{(0)}) \quad \square$$

Megjegyzésként elmondható, hogy ha κ értéke nagy, akkor a módszer nagyon lassan konvergál a megoldáshoz, ami látszik az előző összefüggés alapján. Próbáljunk gyorsabb módszert találni.

4.2. Csebisev-polinomokat alkalmazó iteráció

Szeretnénk az előző iteráció konvergenciáját javítani olyan módon, hogy a lépéshosszt úgy válasszuk meg, hogy csak N lépés után legyen optimális, ne minden egyes lépésben.

Mielőtt a módszer felírására rátérnénk, írjuk fel a Csebisev-polinomok definícióját, illetve elevenítsük fel néhány fontos tulajdonságát, amelyekre a konvergencia gyorsaságának vizsgálatokor szükségünk lesz.

Definíció:

A $-1 \leq x \leq 1$ számokon értelmezett $T_n(x) = \cos(n \arccos(x))$, $n=0, 1, \dots$, alakú polinomokat n -ed fokú Csebisev-polinomoknak nevezzük. Legyen $\theta := \arccos(x)$, ekkor $T_n(x) = \cos(n\theta)$. A $T_n(x)$ nem 1 főegyütthatójú polinom, a főegyütthatója 2^{n-1} . Az 1 főegyütthatójú n -ed fokú Csebisev polinom $\tilde{T}_n(x) = 2^{1-n} T_n(x)$.

Tulajdonságai:

1. $T_n(x)$ -nek egyszeres zérushelyei vannak a következő n darab pontban:

$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right)$, $k=0, 2, \dots, n-1$. Az 1 főegyütthatójú $\tilde{T}_n(x)$ -nek is ezek a gyökei.

2. A $\tilde{T}_n(x)$ az 1 főegyütthatójú n -ed fokú polinom a $[-1; 1]$ intervallumon a 0-tól legkevésbé eltérő polinom az 1 főegyütthatójú polinomok között.

Definíció:

Az 1 főegyütthatójú n -ed fokú Csebisev polinom az $[a; b]$ intervallumon a

$$\tilde{T}_n(x) = \frac{(b-a)^n}{2^{2n-1}} \cos\left(n \arccos\left(\frac{2}{b-a}x - \frac{a+b}{b-a}\right)\right) \quad x \in [a; b].$$

Gyökei : $x_k = \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{2k+1}{2n}\pi\right) + \frac{b+a}{2} \quad k=0, 1, \dots, n-1$, amelyek az intervallumon belül szimmetrikusan helyezkednek el.

Most írjuk fel az iterációt hasonlóan, mint az előbbi módszer esetén:

$$\underline{\mathbf{x}}^{(n+1)} = (\mathbf{I} - s^{(n)} \mathbf{A}) \underline{\mathbf{x}}^{(n)} + s^{(n)} \underline{\mathbf{b}}$$

Szükségünk lesz az iteráció során a sajátértékek korlátaira. Tegyük fel, hogy $m < \alpha, \beta < M$, vagyis az \mathbf{A} mátrix kondíciós számának becslése a korlátok alapján

$$\kappa \leq \frac{M}{m} . \text{ Ha ez egy éles becslés a sajátértékekre nézve, akkor } \kappa \simeq \frac{M}{m} .$$

Igazolni szeretnénk, hogy az így felírt iteráció gyorsabban konvergál a megoldáshoz, mint a legmeredekebb lejtő módszere, alkalmasan megválasztott N szám mellett.

Tudjuk, hogy az $\underline{\mathbf{x}}$ megoldás kielégíti a következő egyenletet: $\underline{\mathbf{x}} = (\mathbf{I} - s^{(n)} \mathbf{A}) \underline{\mathbf{x}} + s^{(n)} \underline{\mathbf{b}}$. Ezt kivonva a felírt iterációból, majd pedig a kapott egyenletre rekurziót alkalmazva jutunk a következő formára. (Felhasználjuk, hogy $\underline{\mathbf{e}}^{(n)} = \underline{\mathbf{x}}^{(n)} - \underline{\mathbf{x}}$.)

$$\underline{\mathbf{e}}^{(n+1)} = (\mathbf{I} - s^{(n)} \mathbf{A}) \underline{\mathbf{e}}^{(n)} \rightarrow \underline{\mathbf{e}}^{(N)} = P^{(N)}(\mathbf{A}) \underline{\mathbf{e}}^{(0)} , \text{ ahol}$$

$$P^{(N)} \text{ a következő polinom } P^{(N)}(a) = \prod_1^N (1 - s^{(n)} a) .$$

Ennek alapján megbecsülhetjük az $\underline{\mathbf{e}}^{(N)}$ nagyságát: $\|\underline{\mathbf{e}}^{(N)}\| \leq \|P^{(N)}(\mathbf{A})\| \|\underline{\mathbf{e}}^{(0)}\|$.

Ahhoz, hogy $\underline{\mathbf{e}}^{(N)}$ becslését tovább tudjuk finomítani, meg kellene becsülnünk a

$\|P^{(n)}(\mathbf{A})\|$ értékét. Mivel az \mathbf{A} mátrixról feltettük, hogy önadjungált, ezért felírható rá a következő becslés $\|P^{(n)}(\mathbf{A})\| \leq \max_{m \leq a \leq M} |P^{(N)}(a)|$, ahol $P^{(N)}(a)$ a $\|P^{(n)}(\mathbf{A})\|$ sajátértékei.

Szeretnénk N értékét úgy megválasztani, hogy a $P^{(N)}$ polinom maximuma az $[m; M]$ intervallumon a lehető legkisebb legyen. Erre az átskálázott Csebisev-

polinomok a legalkalmasabbak: $P^{(N)}(a) = T_N\left(\frac{M+m-2a}{M-m}\right) / T_N\left(\frac{M+m}{M-m}\right)$.

Tudjuk, hogy $T_N(x) \leq 1$, ha $|x| \leq 1$, illetve használjuk fel a $\kappa \simeq \frac{M}{m}$ becslést is,

amiből kapjuk, hogy $\|P^{(n)}(\mathbf{A})\| \leq \max_{m \leq a \leq M} |P^{(N)}(a)| \simeq 1 / T_N\left(\frac{\kappa+1}{\kappa-1}\right)$. Vagyis $\underline{e}^{(N)}$

becslése $\|\underline{e}^{(N)}\| \leq \|\underline{e}^{(0)}\| / T_N\left(\frac{\kappa+1}{\kappa-1}\right)$.

Mivel a Csebisev-polinomok $[-1;1]$ -n kívül végtelenhez tartanak, ezért $\underline{e}^{(N)}$ nullához tart, ha $N \rightarrow \infty$, amiből következik az iteráció konvergenciája.

Be akartuk látni, hogy ez a felírás növeli a konvergenciasebességet, amely a következő átalakítások során kapott alakban látható. A $\sqrt{\kappa}$ sokkal kisebb κ értékénél, ezért a felső korlát sokkal kisebb, mint az előző legmeredekebb lejtő módszerénél felírt felső korlát:

$$\|\underline{e}^{(N)}\| \leq \|\underline{e}^{(0)}\| 2 \left(1 + \frac{2}{\sqrt{\kappa}}\right)^{-N}$$

Nézzünk erre egy példát : (/5/ Lax, 2008)

Tegyük fel, hogy $\kappa = 100$, $\|\underline{e}^{(0)}\| = 1$ és $1/\alpha F(\underline{\mathbf{x}}^{(0)}) = 1$; Mekkora N választás esetén lesz $\|\underline{e}^{(N)}\| \leq 10^{-3}$?

1. Legmeredekebb lejtő módszere:

$$\begin{aligned} \|\underline{\mathbf{e}}^{(n)}\|^2 &\leq \frac{2}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{\kappa}\right)^n F(\underline{\mathbf{x}}^{(0)}) \\ \|\underline{\mathbf{e}}^{(N)}\| &\leq 10^{-3} \\ \|\underline{\mathbf{e}}^{(n)}\|^2 &\leq \frac{2}{\alpha} \left(1 - \frac{1}{100}\right)^n F(\underline{\mathbf{x}}^{(0)}) < 10^{-6} \\ 2 \cdot 0,99^n &< 10^{-6} \\ n &> \frac{\lg(10^{-6}/2)}{\lg 0,99} = 1443,6 \end{aligned}$$

Vagyis ehhez a pontossághoz legalább 1444 lépést kell megtenni.

2. Csebisev-polinomok alkalmazásával felírt iteráció:

$$\begin{aligned} \|\underline{\mathbf{e}}^{(N)}\| &\leq \|\underline{\mathbf{e}}^{(0)}\| 2 \left(1 + \frac{2}{\sqrt{\kappa}}\right)^{-N} < 10^{-3} \\ \frac{2}{\left(1 + \frac{2}{\sqrt{100}}\right)^N} &< 10^{-3} \\ \frac{2}{10^{-3}} &< 1,2^N \\ 41,68 &= \frac{\lg 2000}{\lg 1,2} < N \end{aligned}$$

Vagyis itt elegendő 42 lépést megtenni az adott pontosság eléréséhez. Innen is látszik, hogy ennek a módszernek a konvergenciasebessége jóval gyorsabb, mint az előzőé.

Ötödik fejezet

Azonos példán a módszerek bemutatása

Legyen adott a következő lineáris egyenletrendszer:

$$A \mathbf{x} = \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 1 & 10 \\ 3 & 1 & 35 & 5 \\ 4 & 10 & 5 & 45 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 \\ 36 \\ -19 \\ 119 \end{pmatrix}$$

Oldjuk meg az egyenletrendszert az ismertett direkt és klasszikus iterációs módszerekkel.

1. Gauss-elimináció:

$$\begin{array}{cccc|cccc|c} 1 & 2 & 3 & 4 & 12 & 1 & 2 & 3 & 4 & 12 \\ 2 & 5 & 1 & 10 & 36 & 0 & 1 & -5 & 2 & 12 \\ 3 & 1 & 35 & 5 & -19 & 0 & -5 & 26 & -7 & -55 \\ 4 & 10 & 5 & 45 & 119 & 0 & 2 & -7 & 29 & 71 \end{array} \rightarrow \begin{array}{cccc|cccc|c} 1 & 2 & 3 & 4 & 12 & 1 & 2 & 3 & 4 & 12 \\ 0 & 1 & -5 & 2 & 12 & 0 & 1 & -5 & 2 & 12 \\ 0 & 0 & 1 & 3 & 5 & 0 & 0 & 1 & 3 & 5 \\ 0 & 0 & 3 & 25 & 47 & 0 & 0 & 0 & 16 & 32 \end{array}$$

Innen a megoldások visszahelyettesítéssel megkaphatók

$$x_4 = 2, \quad x_3 = -1, \quad x_2 = 3, \quad x_1 = 1$$

2. LU- felbontás:

Itt az U mátrixot megkaptuk a Gauss-elimináció során, az L mátrix megadásához pedig az egyes lépéseknél használt l_{ij} -re lesz szükségünk.

$$l_{21} = 2/1 = 2; \quad l_{31} = 3/1 = 3; \quad l_{41} = 4/1 = 4$$

$$l_{32} = -5/1 = -5; \quad l_{42} = 2/1 = 2$$

$$l_{43} = 3/1 = 3$$

Vagyis az LU- felbontása a következő alakú:

$$LU = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & -5 & 1 & 0 \\ 4 & 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & -5 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 16 \end{pmatrix}$$

Innen pedig már a megoldás az $L\mathbf{y}=\mathbf{b}$ és $U\mathbf{x}=\mathbf{y}$ egyenletrendszerek megoldásával meghatározható.

3. Cholesky- felbontás:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 1 & 10 \\ 3 & 1 & 35 & 5 \\ 4 & 10 & 5 & 45 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 & 0 \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} & 0 \\ g_{41} & g_{42} & g_{43} & g_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} & g_{41} \\ 0 & g_{22} & g_{32} & g_{42} \\ 0 & 0 & g_{33} & g_{43} \\ 0 & 0 & 0 & g_{44} \end{pmatrix}$$

$$g_{11}^2 = 1 \Rightarrow g_{11} = 1; \quad g_{11}g_{21} = 2 \Rightarrow g_{21} = 2; \quad g_{11}g_{31} = 3 \Rightarrow g_{31} = 3; \quad g_{11}g_{41} = 4 \Rightarrow g_{41} = 4$$

$$g_{21}^2 + g_{22}^2 = 5 \Rightarrow g_{22} = 1; \quad g_{21}g_{31} + g_{22}g_{32} = 1 \Rightarrow g_{32} = -5;$$

$$g_{21}g_{41} + g_{22}g_{42} = 10 \Rightarrow g_{42} = 2$$

$$g_{31}^2 + g_{32}^2 + g_{33}^2 = 35 \Rightarrow g_{33} = 1; \quad g_{31}g_{41} + g_{32}g_{42} + g_{33}g_{43} = 5 \Rightarrow g_{43} = 3$$

$$g_{41}^2 + g_{42}^2 + g_{43}^2 + g_{44}^2 = 45 \Rightarrow g_{44} = 4$$

Tehát a Cholesky-féle felbontás a következően néz ki:

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 5 & 1 & 10 \\ 3 & 1 & 35 & 5 \\ 4 & 10 & 5 & 45 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 & 0 \\ 3 & -5 & 1 & 0 \\ 4 & 2 & 3 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 0 & 1 & -5 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \\ 0 & 0 & 0 & 4 \end{pmatrix}$$

Persze itt szintén tovább kellene számolni, hogy a pontos megoldást megkapjuk egy lineáris egyenletrendszer esetében. De ez, éppúgy, mint az LU-felbontás esetében, egy lényegesen egyszerűbb egyenletrendszert eredményez.

4. Jacobi-iteráció:

Itt először is szükségünk lesz az iteráció mátrixára, hogy ellenőrizhessük, konvergens-e az iteráció, vagyis alkalmazhatjuk-e rá ezt a módszert.

$$\mathbf{B}_J = \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L} + \mathbf{U}). \text{ Vagyis } \mathbf{B}_J = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 35 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 45 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -2 & -3 & -4 \\ -2 & 0 & -1 & -10 \\ -3 & -1 & 0 & -5 \\ -4 & -10 & -5 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{B}_J = \begin{pmatrix} 0 & -2 & -3 & -4 \\ -2/5 & 0 & -1/5 & -2 \\ -3/35 & -1/35 & 0 & -5/35 \\ -4/45 & -10/45 & -5/45 & 0 \end{pmatrix},$$

amelynek a spektrálsugara $\rho(\mathbf{B}_J) = 1,5591 > 1$, vagyis nem konvergens az iteráció, ezért nem lehet Jacobi-iterációval megoldani a feladatot.

5. Gauss-Seidel-iteráció

Itt is először felírjuk az iteráció mátrixát ahhoz, hogy ellenőrizni tudjuk az alkalmazhatóságot.

$$\mathbf{B}_{GS} = (\mathbf{D} - \mathbf{L})^{-1} \mathbf{U}, \text{ alapján } \mathbf{B}_{GS} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 2 & 5 & 0 & 0 \\ 3 & 1 & 35 & 0 \\ 4 & 10 & 5 & 45 \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} 0 & -2 & -3 & -4 \\ 0 & 0 & -1 & -10 \\ 0 & 0 & 0 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

$$\mathbf{B}_{GS} = \begin{pmatrix} 0 & -2 & -3 & -4 \\ 0 & 4/5 & 1 & -2/5 \\ 0 & 26/175 & 40/175 & 37/175 \\ 0 & -26/1575 & 30/1575 & 663/1575 \end{pmatrix}$$

Ennek a spektrálsugara $\rho(\mathbf{B}_{GS}) = 0,9963 < 1$, vagyis konvergens bármely kezdővektor esetén. Tegyük meg 2 lépést a koordinátás alak segítségével.

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

Legyen a kezdővektor a $\underline{\mathbf{x}}^{(0)} = (0 \ 0 \ 0 \ 0)^T$.

$$\text{Ekkor az } \underline{\mathbf{x}}^{(1)} = \left(12 \quad \frac{12}{5} \quad \frac{-41}{25} \quad \frac{92}{75} \right)^T.$$

$$x_1^{(2)} = \frac{-1}{1} \left(2 \cdot \frac{12}{5} + 3 \cdot \frac{-41}{25} + 4 \cdot \frac{92}{75} - 12 \right) = 7,21$$

$$x_2^{(2)} = \frac{-1}{5} \left(2 \cdot 7,21 + 1 \cdot \frac{-41}{25} + 10 \cdot \frac{92}{75} - 36 \right) = 2,19$$

$$x_3^{(2)} = \frac{-1}{35} \left(3 \cdot 7,21 + 1 \cdot 2,19 + 5 \cdot \frac{92}{75} + 19 \right) = -1,4$$

$$x_4^{(2)} = \frac{-1}{45} (4 \cdot 7,21 + 10 \cdot 2,19 + 5 \cdot (-1,4) - 119) = 1,67$$

A második lépés eredménye : $\underline{\mathbf{x}}^{(2)} = \begin{pmatrix} 7,21 \\ 2,19 \\ -1,4 \\ 1,67 \end{pmatrix}$.

Mivel láttuk, hogy a spektrálsugár közel 1, ezért tudjuk, hogy a Gauss-Seidel iteráció lassan konvergál a megoldáshoz.

6. Richardson – iteráció

Végül tekintsük az utolsó klasszikus iterációs módszert. A Richardson-iteráció esetén

számoljuk ki az optimális paramétert: $p_{opt} = \frac{2}{\lambda_1 + \lambda_n}$, vagyis szükségünk lesz a

mátrix sajátértékei közül a legnagyobbra és legkisebbre. Ezek értéke

$\lambda_1 = 49,7279$; $\lambda_n = 0,00318$, amiből az optimális paraméter értéke $p_{opt} = 0,04$. Az

iterációs mátrix ekkor a következő alakú : $\mathbf{B}_R(p) = \mathbf{I} - p \mathbf{A}$. Írjuk fel rá az iterációs mátrixot és tegyük meg 2 lépést a módszerrel.

$$\mathbf{B}_R = \begin{pmatrix} 0,96 & -0,08 & -0,12 & -0,16 \\ -0,08 & 0,8 & -0,04 & -0,4 \\ -0,12 & -0,04 & -0,4 & -0,2 \\ -0,16 & -0,4 & -0,2 & -0,8 \end{pmatrix}$$

Az iteráció felírása: $\underline{\mathbf{x}}^{(k+1)} = (\mathbf{I} - p \mathbf{A}) \underline{\mathbf{x}}^{(k)} + p \underline{\mathbf{b}}$

Legyen a kezdővektor a $\underline{\mathbf{x}}^{(0)} = (0 \ 0 \ 0 \ 0)^T$.

Ekkor $\underline{\mathbf{x}}^{(1)} = (0,48 \ 1,44 \ -0,76 \ 4,76)^T$,

illetve $\underline{\mathbf{x}}^{(2)} = (0,1552 \ 0,68 \ -1,5235 \ 0,4512)^T$.

Ha kiszámoljuk a spektrálsugarat itt is közel 1-t kapunk ennek értékére, amelyből következik, hogy ez az iteráció is lassan konvergál a megoldáshoz.

Összegzésként elmondható, hogy a feladat a Jacobi-iteráció kivételével mindegyik módszerrel megoldható, de az adott esetben a Gauss-elimináció hozott leggyorsabb eredményt, hiszen a többi direkt megoldás során még plusz lépéseket kell végeznünk a feladat megoldásához. Az iterációs módszereink legjobban pedig számítógép segítségével alkalmazhatók jól, mivel sok lépést „kézzel” igen hosszadalmas kiszámolni, ha spektrálsugár közel egy értékű, mint itt.

Összegzés

Dolgozatom során megismerkedtünk a lineáris egyenletrendszerek megoldási módszerei közül néhányal. A direkt módszerek közül ismertettem a Gauss-elimináció folyamatát és alkalmazhatóságát, az LU- felbontás menetét illetve azt hogy milyen feladat típusok megoldására lehet használni. Ismertettem a speciális mátrixok esetén működő Cholesky-felbontás algoritmusát, amely csak szimmetrikusság és pozitív definités fennállása esetén alkalmazható. Ezek után rátértünk a klasszikus iterációs módszerekre, amely közül a Jacobi-, Gauss-Seidel- és a Richardson-iteráció menetével, konvergencia feltételével, leállási kritériumaival ismerkedtünk meg. Itt láttunk példát arra, hogy viszonylag gyorsan, pár lépés után már megoldáshoz jutottunk, illetve arra is, hogy csak sok lépés után kapnánk közelítőleg jó megoldást. Végül megismerkedtünk két modern algoritmussal, a legmeredekebb lejtő módszerét alkalmazó és a Csebisev-polinomok segítségével felírható iterációval. Ezeket a módszereket természetesen számítógépes programozás segítségével érdemes használni, de ez az iterációs módszerek mindegyikére elmondható, hiszen mint láthattuk is a példák során, elég kényelmetlen ezek kiszámolása, ha az iteráció mátrixa nem egész együtthetős. Majd pedig egy konkrét példán szemléltettem a módszereket, ahol a legkönnyebben a Gauss-elimináció során jutottunk a megoldáshoz. Általánosan is elmondható, hogy viszonylag kisméretű mátrixok esetén, ha csak a megoldást keressük, a Gauss-elimináció alkalmazható a legkönnyebben. Egyéb módszerekhez akkor érdemes fordulni, ha a Gauss-módszer nem alkalmazható, vagy ha több információra is szükségünk van, pl. az együtthetős mátrix sajátértékeire, sajátvektoraira. Nagy méretű mátrixok esetén az iterációs módszerek segítségével határozhatjuk meg a megoldást a legegyszerűbben, természetesen számítógép segítségével. Ilyenkor a direkt módszerek kevésbé

alkalmasak a hosszadalmas számolás miatt.

Egy másik alkalmazás, ahol az iterációs módszerek előnyösebbek, ha az adatok, és így az egyenletrendszer naponta változnak, és a múltbeli állapotból következtetni akarunk a jelenre, jövőre. Ismét másik alkalmazás, ha az adatokat mátrix formájában rögzítjük, és a modellt egyszerűsíteni akarjuk egy kisebb rangú mátrix segítségével, ami elég jól közelíti az alaphelyzetet.

Összegzésként elmondható, hogy a lineáris egyenletrendszerek megoldási módszereinek a tárháza igen széles spektrumú. Az algoritmus kiválasztása esetén mindig először meg kell vizsgálnunk azt, hogy alkalmazható-e az adott egyenletrendszerre - és ha több is, melyik a legelőnyösebb -, és csak ezek után állhatunk neki a konkrét megoldásnak.

Irodalomjegyzék

1. Freud Róbert : Lineáris Algebra
(ELTE Eötvös Kiadó, 1998)
2. Grégoire Allaire, Sidi Mahmoud Kaber: Numerical Linear Algebra
(Springer, 2008)
3. Faragó István – Horváth Róbert : Numerikus módszerek
(Typotex, 2011)
4. Bozsik József, Krebsz Anna : Numerikus módszerek példatár
(ELTE- IK, 2010)
5. Peter D. Lax : Lineáris algebra és alkalmazásai
(Akadémiai Kiadó, 2008)
6. Alkalmazott analízis I-II. Jegyzet
(Faragó István előadása alapján)