

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR

**LINEÁRIS ALGEBRAI EGYENLETRENDSZEREK
DIREKT ÉS ITERATÍV MEGOLDÁSI MÓDSZEREI**

BSc szakdolgozat

Készítette: Várhegyi Bence
Matematika BSc
Matematikai elemző szakirány

Témavezető: Karátson János
Alkalmazott Analízis és Számításmatematikai Tanszék



Budapest
2016

Köszönetnyilvánítás

Szeretném megköszönni témavezetőmnek, Karátson Jánosnak a szakdolgozatom megírása kapcsán nyújtott összes segítségét, magyarázatát, útmutatását. Emellett köszönöm családomnak és barátaimnak a támogatást.

Tartalomjegyzék

1. Bevezetés	4
2. Algebrai ismeretek	4
3. Direkt módszerek: Gauss-elimináció	6
3.1. Az általános módszer	7
3.1.1. Főelemkiválasztás	8
3.2. Ingamódszer (rövidített/sávós Gauss).....	9
3.3. Cramer-szabály	10
3.4. Mátrixfelbontások.....	10
3.4.1. LU-felbontás.....	11
3.4.2. LDM^T -felbontás	12
3.4.3. Cholesky-felbontás.....	13
4. Iterációs módszerek: klasszikus iterációk	14
4.1. Jacobi-iteráció	15
4.2. Gauss-Seidel-iteráció	16
4.3. Feladatmegoldás Matlab segítségével	16
4.4. Relaxált változatok	18
4.4.1. JOR-módszer.....	18
4.4.2. SOR-módszer	19
4.5. Stacionárius, egyszerű iteráció.....	20
4.7. Mikor álljunk le az iterációval?	22
4.8. Alkalmazás differenciálegyenletre (peremérték-feladat).....	22
5. Iterációs módszerek: variációs iterációk (szimmetrikus mátrix esete)	24
5.1. Gradiens-módszer	25
5.2. Konjugált gradiens-módszer	26
5.3. Prekondicionált változatok	30
5.4. Nem szimmetrikus vagy nem pozitív definit mátrix esete.....	31
6. Irodalomjegyzék	35

1. Bevezetés

Szakedolgozatom témájának a lineáris algebrai egyenletrendszerek direkt és iteratív megoldási módszereit választottam. A megoldási módszerek fontossága abban áll, hogy olyan egyenletrendszereket tudunk megoldani, melyek sok változóval rendelkeznek. Számos tudományterületi és gyakorlati modell (közgazdaságtan, mérnöki, fizikai) alapja a lineáris algebrai egyenletrendszerek. A téma kifejtését 4 fejezetre osztottam.

A második fejezet ismerteti az elméleti háttérrel kapcsolatos legfontosabb ismereteket. Szóba kerül többek között a mátrix rangjának fogalma, a homogén lineáris egyenletrendszerek, illetve a lineáris algebrai egyenletrendszer megoldhatóságával kapcsolatos tudnivalók.

A harmadik fejezet bemutatja a lineáris algebrai egyenletrendszerek egyik megoldási módját: a direkt módszereket. Ezek közül a legismertebb a Gauss-elimináció, illetve ennek speciális esete az ingamódszer. A fejezet továbbá taglalja a Cramer-szabályt, valamint néhány speciális mátrixfelbontást (LU-felbontás, Cholesky-felbontás, LDM^T-felbontás). A megoldáshoz véges sok aritmetikai művelet segítségével jutunk el. Az ebben a fejezetben lévő módszerek hatékonyak kis egyenletrendszerekre, de nagyobbakra lassúak. A direkt módszerek helyett ilyenkor iterációs eljárásokat használunk.

A negyedik fejezet a klasszikus iterációs eljárásokról szól. Az összes ide tartozó módszer lényege, hogy konvergens sorozatot konstruálunk, melynek határértéke megadja a lineáris algebrai egyenletrendszer megoldását. A klasszikus iterációk közé tartozik többek között a Jacobi, Gauss-Seidel, egyszerű és Richardson-iteráció. Mindegyik iteráció azon alapul, hogy az egyenletrendszer együtthatómátrixát felbontjuk speciális mátrixok összegére. Attól függően, hogy milyen tulajdonságokkal rendelkezik a felbontott mátrix, alkalmazható egyik vagy másik módszer.

Az ötödik fejezetben a variációs iterációs módszerekről lesz szó. Ez a rész szinte kizárólag olyan egyenletrendszerekkel foglalkozik, melynek együtthatómátrixa szimmetrikus és pozitív definit. Az ide tartozó módszerek lényege az, hogy egy olyan többváltozós függvényt adunk meg, melynek abszolút minimumhelye az egyenletrendszer megoldása. A minimumhelyet iteráció segítségével keressük meg. A legismertebb módszerek a gradiens és konjugált-gradiens eljárások. A fejezet megemlíti prekondicionálását és azt az esetet, amikor az együtthatómátrix valamelyik említett tulajdonsága sérül (nem szimmetrikus vagy nem pozitív definit).

2. Algebrai ismeretek

A lineáris algebrai egyenletrendszerek kétféle alakban írhatóak fel: egyenletenként és mátrixos formában. Tegyük fel, hogy adottak az a_{ij} és b_i valós számok, ahol $i=1\dots k$, $j=1\dots m$, amennyiben k db egyenletből és m db ismeretlenből áll az egyenletrendszer.

Ebben az esetben a feladat olyan x_j ($j=1 \dots m$) számok megtalálása, amelyek kielégítik a következő egyenletrendszert :

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1m}x_m &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2m}x_m &= b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + \dots + a_{3m}x_m &= b_3 \\ &\vdots \\ a_{k1}x_1 + a_{k2}x_2 + a_{k3}x_3 + \dots + a_{km}x_m &= b_k \end{aligned}$$

Az előzőleg ismertett általános alak felírható mátrixos alakban a következő módon. Jelölje \mathbf{A} az együtthatómátrixot, amely az a_{ij} együtthatókat tartalmazza. Jelen esetben ennek a mátrixnak k db sora és m db oszlopa lesz. Legyen \mathbf{b} egy olyan oszlopvektor, amely az egyenletrendszer jobb oldalán lévő számokból (k db) áll:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2m} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3m} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & a_{k3} & \dots & a_{km} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \\ \vdots \\ b_k \end{pmatrix}.$$

Olyan m dimenziós x vektort keresünk, melyre $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ egyenlőség teljesül.

A lineáris algebrai egyenletrendszerek megoldása során alapvetően két kérdés merül fel:

1. Mikor oldható meg a feladat?
2. Hány megoldás van?

A megoldhatósággal kapcsolatos tétel ismertetése előtt definiáljuk a mátrix rangjának fogalmát, valamint az $\mathbf{A|b}$ kibővített mátrixot.

Definíció. ([6]) Egy vektorrendszer rangja r , ha van közöttük r db lineárisan független vektor, de r -nél több lineárisan független nincs.

Definíció. Egy mátrix rangján az oszlopaiból (soraiból) álló vektorrendszer rangját értjük.

Definíció. A következő, k sorból és $m+1$ oszlopból álló mátrixot nevezzük $\mathbf{A|b}$ kibővített mátrixnak:

$$\mathbf{A|b} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1m} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2m} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & \dots & a_{3m} & b_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{k1} & a_{k2} & a_{k3} & \dots & a_{km} & b_k \end{pmatrix}$$

Az alábbi tétel a megoldhatósággal és a megoldások számával kapcsolatban fogalmaz meg feltételeket.

Tétel. Egy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ lineáris egyenletrendszer akkor és csak akkor megoldható, ha az A együtthatómátrix és az $A|\mathbf{b}$ kibővített mátrix rangja megegyezik: $r(A) = r(A|\mathbf{b})$. Ezen belül két eset fordulhat elő:

1. $r(A) = r(A|\mathbf{b})$ és ezek megegyeznek az ismeretlenek számával, akkor egy megoldás van.
2. $r(A) = r(A|\mathbf{b})$ és ezek kisebbek az ismeretlenek számánál, akkor végtelen sok megoldás van.

Amennyiben $r(A) \neq r(A|\mathbf{b})$, akkor nincs megoldás.

A következő tétel arra a fő esetre vonatkozik, amikor az együtthatómátrix négyzetes.

Tétel. Egy $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ lineáris egyenletrendszerben négyzetes A mátrix esetén a következő állítások ekvivalensek:

1. $\forall \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ vektorra $\exists! \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$
2. $\mathbf{b} = \mathbf{0} \leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$
3. $\det A \neq 0$
4. $\exists A^{-1}$ reguláris mátrix

A fejezet zárása megemlíti a homogén lineáris egyenletrendszerekkel kapcsolatos ismereteket.

Definíció. ([5]) Egy lineáris egyenletrendszer homogén, ha a jobb oldalán szereplő mindegyik b_j nullával egyenlő.

Tétel. ([5]) Ha egy homogén lineáris egyenletrendszerben az egyenletek száma kisebb, mint az ismeretlenek száma, akkor van nemtriviális megoldás.

Megjegyzés. A megfelelő dimenziós, csupa nullákból álló vektor megoldása a homogén lineáris egyenletrendszernek.

3. Direkt módszerek: Gauss-elimináció

Innentől kezdve olyan egyenletrendszereket tekintünk, ahol az együtthatómátrix négyzetes és determinánsa nem nulla. Koordinátáinként kiírva:

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2n}x_n &= b_2 \\ &\vdots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + a_{n3}x_3 + \dots + a_{nn}x_n &= b_n \end{aligned} \tag{1}$$

Ebben a fejezetben a lineáris algebrai egyenletrendszerek egyik megoldási módszeréről lesz szó: a direkt módszerekről. Az iterációs eljárások a későbbi fejezetekben kerülnek elő. A direkt módszereknél aritmetikai műveletek sorozataként jutunk el a megoldásig. Ha a véges sok lépés mindegyike pontos, azaz nem hibával terhelt, akkor az egyenletrendszer pontos megoldását kapjuk. A módszer előnye, hogy kis egyenletrendszerekre hatékony, pontos. Azonban nagyobb méretű feladatokra nem hatékony és a kiszámolás hosszadalmas. Egyik legismertebb direkt módszer a Gauss-elimináció.

3.1. Az általános módszer

A módszer alapvetően két részre bontható. Az első rész az elimináció, amikor is ekvivalens lépéseket hajtunk végre és felsőháromszög-mátrix alakra hozzuk az együtthatómátrixot. Ez azt jelenti, hogy az utolsó egyenletben csak az utolsó ismeretlen szerepel és visszafelé haladva a sorokban mindig eggyel több ismeretlen szerepel. Mátrixokban gondolkodva pedig azt mondhatjuk, hogy az együtthatómátrix főátló alatti elemei nullák. Milyen ekvivalens átalakításokat tehetünk az egyenletekkel?

- Egy nem nulla skalárral végigszorozhatunk egy egyenletet.
- Az egyenleteket felcserélhetjük.
- Valamelyik egyenlethez hozzáadhatjuk egy másik skalárszorosát.
- Triviális, hogy elhagyhatjuk az olyan egyenleteket, ahol a bal oldal együtthatói és a jobb oldali konstans is 0.

A módszer második része a visszahelyettesítés. Elértük azt, hogy felsőháromszög-mátrix alakra hozzuk az együtthatómátrixot. Ezt követően az utolsó egyenletben egy ismeretlen szerepel, ezt könnyedén meg is tudjuk határozni. Az utolsó előtti egyenletben két ismeretlen szerepel, de az egyiket az előbb már kiszámoltuk, így megint csak egy ismeretlen szerepel. Ezt folytatva az utolsó egyenletből kiindulva ki tudjuk számolni az összes ismeretlent, hiszen minden egyenletben már csak egy ismeretlen szerepel. A következő tétel egy kritériumot fogalmaz meg azzal kapcsolatban, hogy mikor is hajtható végre az előzőleg ismertett eljárás.

Tétel. ([2]) A Gauss-elimináció pontosan akkor hajtható végre, ha az együtthatómátrix összes főminorjának determinánsa nem nulla.

Formálisan felírva:

$$\det \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1m} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mm} \end{pmatrix} \neq 0 \text{ és } m = 1, \dots, n$$

Példa. Oldjuk meg a következő egyenletrendszert Gauss-eliminációval!

$$6x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 20$$

$$-7x_1 - 5x_2 + 3x_3 = -8$$

$$4x_1 - 2x_2 + x_3 = 3$$

Megoldás:

$$\begin{pmatrix} 6 & 4 & 2 \\ -7 & -5 & 3 \\ 4 & -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ -8 \\ 3 \end{pmatrix}$$

A második sor 6-szorosához hozzáadjuk az első sor 7-szeresét. Továbbá a harmadik sor 3-szorosából levonjuk az első sor 2-szeresét, hogy az első oszlopban kinullázzuk a -7 és 4 elemeket.

$$\begin{pmatrix} 6 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & 32 \\ 0 & -14 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 92 \\ -31 \end{pmatrix}$$

Végezetül a harmadik sorból kivonjuk a második sor 7-szeresét, így kinullázzuk a -14 elemet.

$$\begin{pmatrix} 6 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & 32 \\ 0 & 0 & -225 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 20 \\ 92 \\ -675 \end{pmatrix}$$

Innen kapjuk, hogy $x_3 = \left(\frac{-675}{-225}\right)$, vagyis 3. Visszahelyettesítés után az adódik, hogy $-2x_2 = 92 - (32 \cdot 3) = -4$, vagyis $x_2 = 2$. Valamint $6x_1 = 20 - (2 \cdot 3) - (4 \cdot 2) = 6$, vagyis $x_1 = 1$.

A példában szereplő kis egyenletrendszer jól illusztrálja a Gauss-módszer lépéseit, de a gyakorlatban nagyobb egyenletrendszerekkel van dolgunk.

3.1.1. Főelemkiválasztás

Az előzőekben ismertetett Gauss-eliminációban jelölje $a_{k,k-1}$ azokat az elemeket (főelemek), melyekkel kinulláztuk az alattuk lévő, azonos oszlopban lévő elemeket. A Gauss-módszer során feltettük, hogy ezek nem egyenlők nullával, hiszen nem lehet nullával osztani. Ha a kerekítési hibákat is figyelembe vesszük, akkor az is problémaként merülhet fel, ha kis abszolútértékű a főelem. Ezen problémák megoldására alkalmas a főelemkiválasztás módszere. Ennek két fajtája létezik. Részleges főelemkiválasztásról beszélünk, ha az adott főelemmel megegyező oszlopban lévő és nagyobb sorindexű elemek közül a legnagyobb abszolútértékűt választjuk ki és sorcserével a főátlóba hozzuk. A teljes főelemkiválasztás során $a_{i,j}$ elemek közül a legnagyobb abszolútértékűt választjuk ($i \geq k, i > j$). Majd oszlop- és sorcserével a főátlóba visszük.

3.2. Ingamódszer (rövidített/sávós Gauss)

Az alfejezet eleje röviden bemutatja a differenciálegyenletek megoldása kapcsán gyakran előforduló sávmátrixokat, a továbbiakban viszont ennek speciális esetével foglalkozik, a tridiagonális mátrixokkal. A sávmátrixok olyan speciális mátrixok, ahol a nem nulla elemek a főátlóval párhuzamos sávban helyezkednek el. A következő S mátrix szemlélteti a sávmátrix alakját:

$$S = \begin{pmatrix} * & * & * & & & & \\ * & * & * & * & & & \\ * & * & * & * & * & & \\ & * & * & * & * & * & \\ & & * & * & * & * & \\ & & & * & * & * & \\ & & & & * & * & * \end{pmatrix}$$

A sávmátrixot az alsósáv- és felsősáv szélessége jellemzi. Előbbi az a legkisebb p szám, amelyre $a_{ij} = 0$ bármely $i > j+p$ esetén, utóbbinál pedig $a_{ij} = 0$ bármely $i < j-p$ esetén. A továbbiakban tridiagonális mátrixokkal foglalkozunk, vagyis amikor az alsó- és felsősáv szélessége is 1. Utóbbi speciális esetben a feladatunk a következő módon néz ki:

$$\begin{pmatrix} b_1 & c_1 & & & & \\ a_2 & b_2 & & & & \\ & \ddots & c_2 & & & \\ & & \ddots & b_{n-1} & c_{n-1} & \\ & & & a_n & b_n & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \vdots \\ f_{n-1} \\ f_n \end{pmatrix}$$

Az x_i értékeket keressük, a többi adott. A Gauss-eliminációs eljárás során arra törekszünk, hogy az együtthatómátrix főátló alatti elemeit kinullázzuk. Az alfejezetben tárgyalt tridiagonális mátrixoknál az algoritmus rövidebb lesz, hiszen a főátló alatt mindenhol nullák szerepelnek, kivéve a mellette lévő átlót, amit szubdiagonálnak nevezünk. Az elimináció során a főelemmel osztjuk a sorát is. Ennek hatására a főátlóban 1-esek szerepelnek majd, illetve minden sorban két előre nem ismert elem lesz. Vezessünk be két jelölést. $\alpha_{i+1} = \frac{-c_i}{a_i \alpha_i + b_i}$ és $\beta_{i+1} = \frac{f_i - a_i \beta_i}{a_i \alpha_i + b_i}$. Tekintve, hogy $b_1 x_1 - c_1 x_2 = f_1$, így $\alpha_1 = \beta_1 = 0$. Az elimináció után a következő formát ölti az egyenletrendszer:

$$\begin{pmatrix} 1 & -\alpha_2 & & & & \\ & 1 & -\alpha_3 & & & \\ & & \ddots & & & \\ & & & \ddots & & \\ & & & & 1 & -\alpha_n \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_2 \\ \beta_3 \\ \vdots \\ \beta_n \\ (f_n - a_n \beta_n) / (a_n \alpha_n + b_n) \end{pmatrix}$$

Tehát a visszahelyettesítés során $x_n = \frac{(f_n - a_n \beta_n)}{(a_n \alpha_n + b_n)}$, a többi ismeretlent pedig az alábbi képlettel lehet kiszámolni: $x_{i-1} = \alpha_i x_i + \beta_i$. Az itt ismertetett algoritmust nevezzük ingamódszernek vagy egyszerűsített/sávós Gauss-módszernek.

3.3. Cramer-szabály

Ebben a szakaszban a Cramer-szabályt ismertetjük, amely szintén direkt módszer. A lényege az, hogy bizonyos determinánsok kiszámolásával kapjuk meg az $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ feladat megoldását. Az eljárást gyakorlatban ritkán használják, mert sok számolást igényel. A megoldást a következő képlet segítségével állítjuk elő:

$$x_m = \frac{\det A_m}{\det A}, m = 1, \dots, n$$

Itt A_m egy olyan mátrixot jelöl, amely az m . oszlop kivételével megegyezik az A mátrixszal, de itt az m . oszlopba a \mathbf{b} vektor komponenseit írjuk.

Példa. Oldjuk meg a Cramer-szabály használatával a következő egyenletrendszert!

$$5x_1 - 2x_2 = -9$$

$$-3x_1 + 4x_2 = 11$$

Írjuk fel a képletet először x_1 -re:

$$x_1 = \frac{\det \begin{pmatrix} -9 & -2 \\ 11 & 4 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}} = \frac{-14}{14} = -1$$

Hasonlóan az x_2 -re:

$$x_2 = \frac{\det \begin{pmatrix} 5 & -9 \\ -3 & 11 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 5 & -2 \\ -3 & 4 \end{pmatrix}} = \frac{28}{14} = 2$$

Ellenőrizhetjük a számolásunk helyességét:

$$-5 \cdot 1 - 2 \cdot 2 = -9$$

$$-3 \cdot (-1) + 4 \cdot 2 = 11$$

A Cramer féle megoldási módszer nagy mátrixok esetén rengeteg számolást igényel. Ugyan az A együtthatómátrix determinánsát elég egyszer kiszámolni, de a számlálóban lévő mátrixét az index változásával minden lépésben meg kell határozni. Az algoritmusból az látszik, hogy amennyiben a mátrix mérete nagy, akkor is használható egy vagy néhány komponens meghatározására (például x_1 , x_3 érdekel csak az n db ismeretlenből). Tipikusan azonban az összes komponens érdekel minket, hiszen ez adja a feladat megoldását.

3.4. Mátrixfelbontások

Ebben az alfejezetben olyan direkt módszereket ismertetünk, melynek során az A együtthatómátrixot speciális mátrixok szorzatára bontjuk:

1. LU-felbontás

2. LDM^T-felbontás
3. Cholesky-felbontás

3.4.1. LU-felbontás

Az LU-felbontás során az $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ egyenletet az $(\mathbf{LU})\mathbf{x} = \mathbf{b}$ alakúvá alakítjuk, vagyis az \mathbf{A} mátrixot felbontjuk két mátrix szorzatára. Az \mathbf{L} mátrix alsóháromszög, az \mathbf{U} pedig felsőháromszög-mátrixot jelöl. Előbbi főátlója csupa 1-esekből áll.

Tétel. Az $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrixnak pontosan akkor létezik LU-felbontása, ha egyetlen főminor determinánsa sem nulla.

Az \mathbf{L} és \mathbf{U} mátrixot elemeit a következő képletek segítségével számolhatjuk ki:

$$u_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}), \text{ ahol } i \leq j \leq n$$

$$l_{ij} = \frac{1}{u_{jj}} (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}), \text{ ahol } j+1 \leq i \leq n$$

Az $(\mathbf{LU})\mathbf{x} = \mathbf{b}$ megoldásához $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ és $\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ részfeladatokat kell megoldanunk.

Az $\mathbf{Ly} = \mathbf{b}$ megoldása:

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k \text{ és } 1 \leq i \leq n$$

$\mathbf{Ux} = \mathbf{y}$ megoldása:

$$x_i = \frac{1}{u_{ii}} (y_i - \sum_{k=i+1}^n x_k u_{ik}) \text{ és } 1 \leq i \leq n$$

Példa. Az LU-felbontás segítségével oldjuk meg a következő egyenletrendszert!

$$-x_1 + 3x_2 + 2x_3 = 11$$

$$x_1 + 2x_2 - 3x_3 = -4$$

$$-2x_1 + x_2 - 4x_3 = -12$$

Jelölje \mathbf{A}_1 mátrix az együtthatómátrixot, vagyis $\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} -1 & 3 & 2 \\ 1 & 2 & -3 \\ -2 & 1 & -4 \end{pmatrix}$.

Az \mathbf{L}_1 alsóháromszög-mátrix lesz. A második sorának első elemét a $-a_{21} / a_{11}$ hányados adja, míg harmadik sorának első elemét a $-a_{31} / a_{11}$. A főátló alatt kimaradt elem 0.

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Definiálunk egy $\mathbf{A}_2 = \mathbf{L}_1 \mathbf{A}_1$ mátrixot.

$$A_2 = \begin{pmatrix} -1 & 3 & 2 \\ 0 & 5 & -1 \\ 0 & -5 & -8 \end{pmatrix}$$

Az A_2 mátrixot felhasználva elkészítjük az L_2 mátrixot, amely szintén alsóháromszög-mátrix és ezáltal a harmadik sor második elemén kívül minden nulla, a fennmaradó elem pedig a $-a_{32} / a_{22}$ hányadossal egyenlő az A_2 mátrixot felhasználva.

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Ezt követően kiszámítjuk az $A_3 = L_2 A_2$ mátrixot, ami egyébként az LU-felbontás U mátrixát fogja adni.

$$A_3 = U = \begin{pmatrix} -1 & 3 & 2 \\ 0 & 5 & -1 \\ 0 & 0 & -9 \end{pmatrix}$$

Ahhoz, hogy megkapjuk az L mátrixot, össze kell szorozni L_1 és L_2 inverzét.

$$L_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ és } L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$L = L_1^{-1} L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

A korábban leírtak alapján az $Ly = b$ és $Ux = y$ egyenleteket kell megoldani ahhoz, hogy az eredeti feladat megoldásához eljussunk.

Az $Ly = b$ megoldása:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 2 & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ -4 \\ -12 \end{pmatrix}$$

$$y_1 = 11, y_2 = 7, y_3 = -27$$

Az $Ux = y$ megoldása:

$$\begin{pmatrix} -1 & 3 & 2 \\ 0 & 5 & -1 \\ 0 & 0 & -9 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 7 \\ -27 \end{pmatrix}$$

$$x_1 = 1, x_2 = 2, x_3 = 3$$

3.4.2. LDM^T-felbontás

Az LDM^T felbontás során az A együtthatómátrixot felbontjuk egy alsó-, egy felső- és egy diagonális mátrix szorzatára. Ezek rendre L , M^T és D . Ekkor az $Ax = b$ egyenletrendszer ekvivalens a következő feladattal:

$$\begin{aligned} Ly &= b \\ Dz &= y \\ M^T x &= z \end{aligned}$$

Az egyenletrendszer egymás utáni megoldásával juthatunk el az eredeti feladat megoldásához. A következő tétel elégséges feltételt ad az előbb definiált felbonthatóságra.

Tétel. ([7]) Legyen az A mátrix összes főminorja nem nulla determinánsú. Ilyenkor az LDM^T -felbontás egyértelműen megadható.

3.4.3. Cholesky-felbontás

A Cholesky-felbontás szorosan kapcsolódik az előző felbontáshoz, annak egy speciális esete. A kapcsolat ott jelenik meg, hogy amennyiben az A mátrix speciális alakú és tulajdonságú, akkor az LDM^T -felbontás is speciális lesz. A speciális alak kapcsán azt követeljük meg, hogy az A mátrix szimmetrikus legyen. A következőkben definiálni szeretném a pozitív definit mátrix fogalmát, ugyanis ez lesz az a tulajdonság, amelyről az előzőekben szó esett.

Definíció. Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix pozitív definit, ha minden nem nulla $x \in \mathbb{R}^n$ vektorra $x^T A x > 0$, ahol x^T transzponáltat jelöl.

Tétel. ([7]) Legyen az A mátrix szimmetrikus, pozitív definit. Ekkor A egyértelműen felírható LDL^T alakban, ahol L alsóháromszög-mátrix, főátlója csupa 1-esekből áll és D diagonális mátrix pozitív elemekkel.

Megjegyzés. Amennyiben csak azt tesszük fel, hogy az A mátrix szimmetrikus, attól még az előző felbontás létezhet, de akkor nem igaz, hogy a D mátrix diagonális elemei pozitívak.

Az LDL^T felírásból úgy kapjuk a Cholesky-felbontást, hogy ezt átírjuk $LD^{1/2}D^{1/2}L^T$ alakra. Ha $LD^{1/2}$ mátrixot elnevezzük C^T mátrixnak, akkor $A = C^T C$. Ha az A mátrix szimmetrikus, pozitív definit, akkor az előző felbontás egyértelmű. A C felsőháromszög-mátrix elemei pozitívak és a következő módon számolhatók ki:

$$\begin{aligned} c_{11} &= \sqrt{a_{11}} \text{ és } 2 \leq i \leq n \text{ esetén} \\ c_{ii} &= (a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} c_{ik}^2)^{1/2} \\ c_{ij} &= (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} c_{ik} c_{jk})^{1/2} / c_{jj}, \text{ ahol } 1 \leq j \leq i-1 \end{aligned}$$

4. Iterációs módszerek: klasszikus iterációk

Továbbra is az (1) szerinti lineáris algebrai egyenletrendszereket tekintjük. Ebben a fejezetben és még a következőben is a lineáris algebrai egyenletrendszerek megoldásának egy másik módszeréről lesz szó: az iterációs módszerekről. Az eljárás lényege, hogy konvergens sorozatokat konstruálunk és a határérték adja meg a feladat megoldását. Az iterációs eljárás általános alakja:

$$x^{k+1} = Bx^k + f, \quad k = 0, 1, \dots \quad (2)$$

Itt B egy úgynevezett iterációs mátrix, ami esetleg függhet k -től. Vektorként szerepel a képletben az f és az iteráció k . lépésében kapott x^k közelítés. Jelölje a lineáris algebrai egyenletrendszerünk megoldását x^* . Az x^0 adott lesz az egyenletrendszerünkben és azt várjuk el az x^k sorozattól, hogy tartson x^* -hoz. Az iterációs módszerek kapcsán a következő kérdések merülnek fel:

- 1) Hogyan válasszuk meg a B mátrixot?
- 2) Mikor fog konvergálni a megoldáshoz az előállított sorozat?
- 3) Milyen sebességgel fog konvergálni?
- 4) Mikor álljunk le az iterációval? (Erről a fejezet végén lesz szó.)

Definíció. ([1]) Az $x^{k+1} = Bx^k + f$ iterációt az $Ax = b$ egyenletrendszerrel konzisztensnek hívjuk, ha $x^* = Bx^* + f$.

Tekintsük az $F(x) = Bx + f$ leképezést. Ekkor tetszőleges $x_1, x_2 \in \mathbb{R}^n$ vektorokra igaz a következő becslés valamilyen vektornormában és a megfelelő indukált mátrixnormában:

$$\|F(x_1) - F(x_2)\| = \|Bx_1 + f - (Bx_2 + f)\| = \|B(x_1 - x_2)\| \leq \|B\| \|x_1 - x_2\|$$

Ha $\|B\| < 1$, akkor ez a leképezés kontrakció. A Banach-féle fixponttételre hivatkozva ilyen esetben az iteráció tart az F leképezés fixpontjához, amely a lineáris algebrai egyenletrendszer megoldása. A következő tétel egy univerzális feltételt ad arra, hogy az iteráció milyen B mátrix esetén lesz konvergens.

Tétel. ([1]) Az $Ax = b$ egyenletrendszerrel konzisztens lineáris iteráció pontosan akkor tart az egyenletrendszer megoldásához tetszőleges kezdővektor esetén, ha $\rho(B) < 1$, ahol $\rho(B)$ a spektrálsugarat jelöli.

Bizonyítás. ([1]) Vezessük be az $e^{k+1} = x^{k+1} - x^*$ hibavektort. A konvergenciához az kell, hogy $e^k \rightarrow 0$, tehát valamilyen normában $\|e^k\| \rightarrow 0$. A lineáris iteráció képletét alkalmazva a hibavektorra a következő adódik:

$$e^{k+1} = x^{k+1} - x^* = Bx^k + f - (Bx^* + f) = Be^k$$

Emiatt $e^k = B^k e^0$. A konvergenciához az kell, hogy $B^k \rightarrow 0$ (B^k esetében k már hatványkitevőt jelent, nem k -adik közelítést). Ennek pedig az a feltétele, hogy $\rho(B) < 1$.

A konvergencia sebessége kapcsolatban áll a konvergencia sugarával. Minél kisebb a B mátrix konvergenciasugara, annál nagyobb a konvergencia sebessége.

4.1. Jacobi-iteráció

A Jacobi módszer az egyik legismertebb iterációs eljárás, amely azon alapszik, hogy az A együtthatómátrixot felbontjuk 3 jól meghatározott mátrix összegére. Legyen $A = L+D+U$, ahol L az A mátrix szigorúan alsóháromszögű része, D a diagonális rész, U pedig a szigorúan felsőháromszögű rész. Ekkor az eredeti $Ax = b$ rendszer ekvivalens a következővel:

$$(L+D+U)x = b \quad (3)$$

$$Dx = -(L+U)x + b \quad (4)$$

Ezzel a rendszerrel konzisztens iteráció a következő:

$$\begin{aligned} Dx^{k+1} &= -(L+U)x^k + b \\ x^{k+1} &= -D^{-1}(L+U)x^k + D^{-1}b \end{aligned} \quad (5)$$

Az utolsó sorban megkaptuk a Jacobi-iteráció mátrixos alakját. Ez hasonlít a (2) szerinti általános iterációs képletre, azaz ebben az iterációs eljárásban a $-D^{-1}(L+U)$ mátrix játssza a B , míg $D^{-1}b$ az f szerepét. Az alfejezet lezárásaként definiálunk mátrixcsaládot, amely a Jacobi eljáráshoz köthető és egy tételt fogalmazunk a módszer konvergenciájával kapcsolatban. Jelölje a továbbiakban B_J a $-D^{-1}(L+U)$ mátrixot.

Definíció. Egy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrixot szigorúan diagonálisan dominánsnak nevezzük, ha $|a_{ii}| > \sum_{j=1, j \neq i}^n |a_{ij}|, \forall i = 1, \dots, n$.

Tétel. Legyen az A mátrix szigorúan diagonálisan domináns. Ekkor a Jacobi-iteráció konvergens.

Bizonyítás. ([2]) A konvergenciát úgy bizonyítjuk, hogy megmutatjuk, a B_J mátrix maximumnormája 1-nél kisebb. Itt $B_J = -D^{-1}(L+U) = D^{-1}(D-A)$, mivel $A = L+D+U$. A B_J mátrix elemei a következőképpen néznek ki: $b_{ij} = \frac{-a_{ij}}{a_{ii}}$, ha $i \neq j$, a többi elem 0. A B_J mátrix maximumnormája: $\max_i \sum_{i \neq j} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right|$. Mivel abból indultunk ki, hogy az A mátrix szigorúan diagonálisan domináns, ezért $\max_i \sum_{i \neq j} \left| \frac{a_{ij}}{a_{ii}} \right| < 1$, tehát $\|B_J\|_{\infty} < 1$.

A Jacobi-iterációval kapcsolatban további tételek lesznek megfogalmazva a relaxált változatok szakaszban.

4.2. Gauss-Seidel-iteráció

A Gauss-Seidel módszer során is az előző alfejezetben definiált L , D és U mátrixok összegére bontjuk az A együtthatómátrixot. A (3) szerinti képletet követően másképpen rendezzük az egyenletet:

$$(\mathbf{L}+\mathbf{D})\mathbf{x} = -\mathbf{U}\mathbf{x} + \mathbf{b} \quad (6)$$

Ezzel a rendszerrel konzisztens iteráció a következő:

$$\begin{aligned} (\mathbf{L}+\mathbf{D})\mathbf{x}^{(k+1)} &= -\mathbf{U}\mathbf{x}^k + \mathbf{b} \\ \mathbf{x}^{k+1} &= -(\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\mathbf{U}\mathbf{x}^k + (\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\mathbf{b} \end{aligned} \quad (7)$$

Az utolsó sorban megkaptuk a Gauss-Seidel módszer mátrixos felírását. Összevetve a (2) szerinti képlettel, $-(\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\mathbf{U}$ mátrix jelöli a B mátrixot, míg $(\mathbf{L}+\mathbf{D})^{-1}\mathbf{b}$ megegyezik az \mathbf{f} vektorral. A szakasz zárásaként megemlítünk egy tételt a módszer konvergenciájával kapcsolatban.

Tétel. ([1]) Ha az A együtthatómátrix szimmetrikus és pozitív definit, akkor a Gauss-Seidel iteráció tetszőleges kezdeti vektor esetén konvergál az egyenletrendszer megoldásához.

A Gauss-Seidel-iterációval kapcsolatban további tételek lesznek megfogalmazva a relaxált változatok szakaszban.

4.3. Feladatmegoldás Matlab segítségével

Feladat: Tekintsük a következő lineáris egyenletrendszert! Tegyük meg 10 iterációs lépést a Jacobi és a Gauss-Seidel módszerrel is! Számítsuk ki a pontos megoldás és az alkalmazott módszerek euklideszi normában való eltérését az egyes lépésekben! Írassuk ki a pontos megoldást, valamint a hibát! A hibát ábrázoljuk is! Melyik módszer konvergál gyorsabban?

$$\begin{aligned} 6x_1 - 2x_2 - x_3 + 2x_4 &= 1 \\ x_1 + 3x_2 + x_3 + 2x_4 &= -3 \\ -2x_1 - 4x_2 + 8x_3 + x_4 &= 5 \\ -x_1 + 3x_2 - 2x_3 + 7x_4 &= -7 \end{aligned}$$

Matlab program:

```
clear all
A = [6 -2 -1 2 ; 1 3 1 2; -2 -4 8 1; -1 3 -2 7] ;
b = [1 -3 5 -7]';
x1=A\b;
D = diag(diag(A));
T = D-A;
S = tril (A);
```



```

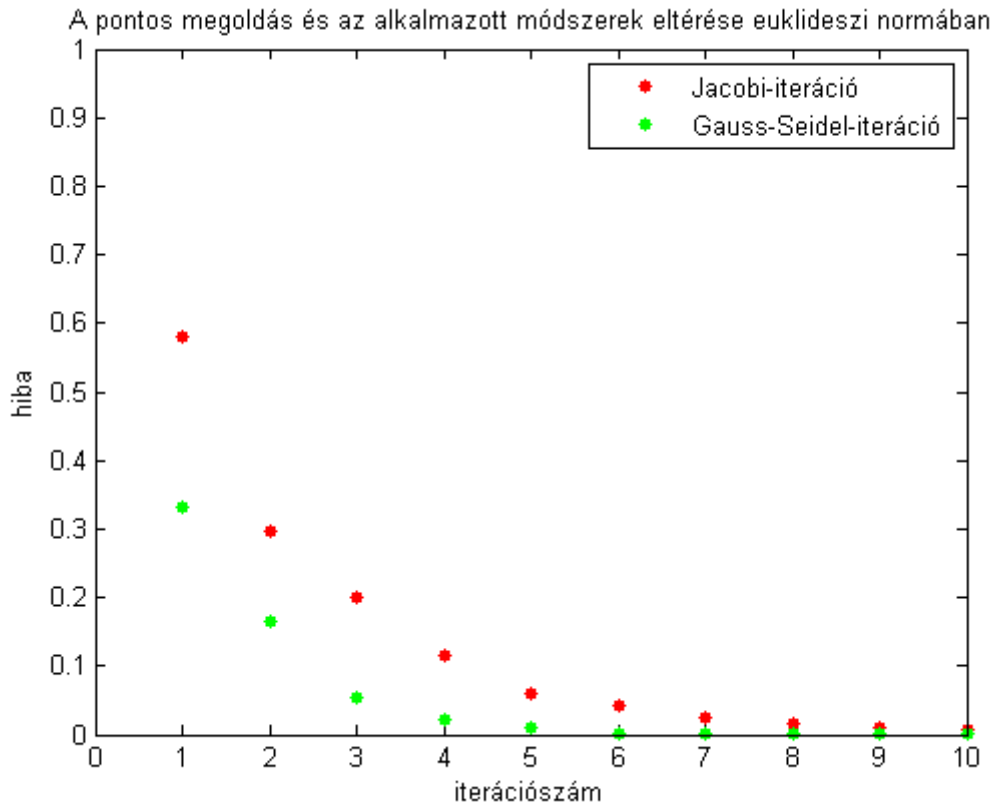
G = S-A;
x2 = zeros(size(b));
x3 = zeros(size(b));
for k = 1:10
    x2 = D\(T*x2+b);
    j(k) = norm(x1-x2,2);
    disp(j(k));
    x3 = S\(G*x3+b);
    g(k) = norm(x1-x3,2);
    disp(g(k));
end
t = 1:10;
plot(t,j, '.r', t,g, '.g', 'MarkerSize',15, 'MarkerSize',15)
title('A pontos megoldás és az alkalmazott módszerek eltérése
euklideszi normában')
legend('Jacobi-iteráció', 'Gauss-Seidel-iteráció')
xlabel('iterációszám')
ylabel('hiba')
axis([0 10 0 1])
megoldas = A\b

```

A pontos megoldás:

$$\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.1393 \\ -0.7993 \\ 0.3314 \\ -0.5455 \end{pmatrix}$$

Az euklideszi normában való eltérések		
Iteráció	Jacobi	Gauss-Seidel
1.	$5.799 \cdot 10^{-1}$	$3.322 \cdot 10^{-1}$
2.	$2.974 \cdot 10^{-1}$	$1.651 \cdot 10^{-1}$
3.	$1.992 \cdot 10^{-1}$	$5.44 \cdot 10^{-2}$
4.	$1.156 \cdot 10^{-1}$	$2.14 \cdot 10^{-2}$
5.	$6.05 \cdot 10^{-2}$	$9.1 \cdot 10^{-3}$
6.	$4.24 \cdot 10^{-2}$	$2.8 \cdot 10^{-3}$
7.	$2.58 \cdot 10^{-2}$	$1.4 \cdot 10^{-3}$
8.	$1.53 \cdot 10^{-2}$	$4.3456 \cdot 10^{-4}$
9.	$1.04 \cdot 10^{-2}$	$1.7710 \cdot 10^{-4}$
10.	$6.7 \cdot 10^{-3}$	$7.3369 \cdot 10^{-5}$



Ezek alapján elmondható, hogy a példában Gauss-Seidel módszer gyorsabban konvergál a megoldásához.

4.4. Relaxált változatok

Az előző részekben láthattuk, hogy a mátrixok spektrálsugara feltételként szerepelt az iterációs módszerek konvergenciájával kapcsolatban. Akkor voltak konvergensek a módszerek, ha ez az érték 1-nél kisebb volt. Azonban előfordulhat, hogy ez az érték 1-nél nagyobb, illetve nagyon közel van egyhez. Ilyenkor két eset fordul elő: lassan konvergál az iteráció vagy egyáltalán nem is konvergál. Szeretnénk elérni, hogy az iteráció ilyenkor is konvergáljon és gyorsan, így bevezetünk egy paramétert. A következő szakaszok a JOR és SOR módszereket ismertetik.

4.4.1. JOR-módszer

Írjuk fel a $(k+1)$ -edik iterációs vektor i -edik elemét:

$$x_i^{k+1} = x_i^k + (x_i^{k+1} - x_i^k). \quad (8)$$

Vezessük be a ω relaxációs paramétert és a $x_{i,J}^{k+1}$ jelölést. Utóbbi egy olyan értéket jelöl, amit a Jacobi iteráció ad a $(k+1)$ -edik iterációs vektor i -edik elemére, ha azt az x^k vektor eleméből számítanánk és legyen

$$x_i^{k+1} = x_i^k + \omega (x_{i,j}^{k+1} - x_i^k). \quad (9)$$

Ha az $x^{(k+1)}$ vektor képletét behelyettesítjük a (5) szerinti Jacobi-iteráció képletébe, akkor megkapjuk a JOR módszer mátrixos alakját:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}^{k+1} &= \mathbf{x}^k - \omega (\mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L}+\mathbf{U})\mathbf{x}^k + \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} - \mathbf{x}^k) \\ \mathbf{x}^{k+1} &= ((1-\omega) \mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L}+\mathbf{U}))\mathbf{x}^k + \omega \mathbf{D}^{-1}\mathbf{b} \end{aligned} \quad (10)$$

A képletben \mathbf{I} jelöli az egységmátrixot. Jelölje ebben az esetben B_{JOR} az iterációs mátrixot, ami a $(1-\omega) \mathbf{I} - \omega \mathbf{D}^{-1} (\mathbf{L}+\mathbf{U})$ mátrix.

4.4.2. SOR-módszer

Ennél a módszernél a kiindulási alap a (7) szerinti Gauss-Seidel iteráció mátrixos alakja. Felhasználjuk az előző részben szerepelt relaxációs képletet, de $x_{i,j}^{k+1}$ -t helyettesítjük $x_{i,GS}^{k+1}$ értékével. Utóbbi a k-adik iterációs vektor elemeiből és a (k+1)-edik iterációs vektor már kiszámolt elemeiből számítjuk ki a Gauss-Seidel módszerrel. Ekkor a mátrixos alak a következő:

$$\mathbf{x}^{k+1} = (\mathbf{D}+\omega\mathbf{L})^{-1} ((1-\omega\mathbf{D})-\omega\mathbf{U})\mathbf{x}^k - \omega (\mathbf{D}+\omega\mathbf{L})^{-1}\mathbf{b} \quad (11)$$

Jelölje B_{SOR} az iterációs mátrixot és megegyezik $(\mathbf{D}+\omega\mathbf{L})^{-1} ((1-\omega\mathbf{D})-\omega\mathbf{U})$ mátrixszal. A relaxált változatok szakaszt az M-mátrix és a reguláris felbontás definiálásával és néhány konvergenciával kapcsolatos tétellel zárjuk.

Definíció. Az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix M-mátrix, ha

- $a_{ij} \leq 0 \quad \forall i \neq j$ -re
- $\exists g \in \mathbb{R}^n > 0$, hogy $Ag > 0$

Definíció. ([2]) Legyen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és $A = P-Q$, ahol P reguláris és $P^{-1} \geq 0$, $Q \geq 0$ és $\rho(P^{-1}Q) < 1$. Ilyenkor a $P-Q$ az A mátrix reguláris felbontása.

Tétel. Legyen $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és $A = P-Q$ reguláris felbontás. Ekkor a $Px^{k+1} = Qx^k + b$ iteráció konvergens.

Tétel. ([1]) Ha az A együtthatómátrix M-mátrix, akkor a Jacobi, Gauss-Seidel iterációk és ezek relaxált változatai $\omega \in (0, 1)$ mellett konvergálnak az egyenletrendszer megoldásához tetszőleges kezdeti vektor esetén.

Bizonyítás. ([1]) Ha az A együtthatómátrix M-mátrix, akkor $A^{-1} \geq 0$. A JOR és SOR iterációkra $\omega \in (0, 1]$ mellett az előzőleg definiált P és Q mátrixok egy reguláris felbontását adják az A mátrixnak, tehát az iteráció konvergens lesz. A JOR és SOR módszereknél az $\omega = 1$ esetben kapjuk meg a Jacobi és Gauss-Seidel iterációkat.

Tétel (Kahan-tétel). ([1]) A SOR módszer esetén $\rho(B_{\text{SOR}}) \geq |1-\omega|$, azaz a konvergencia szükséges feltétele, hogy $\omega \in (0, 2)$.

Bizonyítás. ([1]) $\prod_{i=1}^n |\lambda_i| = |\det B_{sor}| = |1 - \omega|^n$. A számtani és mértani közép közti összefüggést felhasználva $\rho(B_{sor}) \geq (\prod_{i=1}^n |\lambda_i|)^{1/n} = |1 - \omega|$.

Tétel (Ostrowski-tétel). ([1]) Ha B szimmetrikus, pozitív definit mátrix és $\omega \in (0, 2)$, akkor $\rho(B_{sor}) < 1$, azaz a SOR iteráció konvergens.

A tételből következik, hogy a Kahan tétel feltétele elégséges is a konvergenciához szimmetrikus, pozitív definit mátrix esetén.

4.5. Stacionárius, egyszerű iteráció

Az iterációs módszerek tárgyalását az (2) szerinti képlet bevezetésével kezdtük, ahol B egy iterációs mátrix volt. Az alfejezetben tárgyalt stacionárius módszer esetében a B mátrix független a lépésszámtól. Az általános egy lépéses stacionárius eljárások a következő alakban írhatóak fel:

$$\frac{1}{\omega} B(x^{m+1} - x^m) + Ax^m = f, \text{ ahol } \omega > 0 \quad (12)$$

Tétel. ([7]) Ha A szimmetrikus, szigorúan pozitív definit mátrix, akkor $B - 0,5\omega A > 0$ esetén az általános egy lépéses stacionárius iteráció konvergens.

A stacionárius iteráció egy speciális esete az egyszerű iteráció. Ebben az esetben B egységmátrix, vagyis az általános egy lépéses stacionárius módszer képlete így módosul:

$$\frac{1}{\omega}(x^{m+1} - x^m) + Ax^m = f$$

$$x^{m+1} = (I - \omega A)x^m + \omega f, \text{ ahol I egységmátrix} \quad (13)$$

Megjegyzés. Azt az iterációt, ahol a (13) szerinti képlet ω értéke függ a lépésszámtól, Richardson-iterációnak nevezzük.

Az a cél, hogy úgy válasszuk meg az ω paramétert, hogy az egyszerű iteráció minél gyorsabban konvergáljon a megoldáshoz. A következő tétel megmondja, hogy mi ez az érték. Előtte vezessük be az M és m jelöléseket. Előbbi az A mátrix legnagyobb, utóbbi az A mátrix legkisebb sajátértéke.

Tétel. ([7]) Ha A szimmetrikus, szigorúan pozitív definit mátrix, akkor az egyszerű iteráció konvergenciájának szükséges és elégséges feltétele: $0 < \omega < \frac{2}{M}$, az optimális ω paramétere, $\omega = \frac{2}{M+m}$ és a hozzá tartozó spektrálsugár: $\frac{M-m}{M+m}$.

Bizonyítás. Jelölje B_ω az $E - \omega A$ mátrixot. A B_ω mátrix sajátértékei a következőképpen néznek ki: $1 - \omega \lambda_i$. Hiszen $Av = \lambda_i v \rightarrow (E - \omega A)v = v - \omega Av = v - \omega \lambda_i v = (1 - \omega \lambda_i)v$. Feltehető, hogy $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n$. Ekkor a sajátértékek a következő alakban írhatóak:

$$\lambda_1(B_\omega) = 1 - \omega m$$

$$\lambda_2(B_\omega) = 1 - \omega \lambda_2$$

⋮

$$\lambda_n(B_\omega) = 1 - \omega M$$

A B_ω mátrix spektrálsugara így: $\max_{1 \leq i \leq n} |1 - \omega \lambda_i|$. Az egyszerű-iteráció akkor lesz konvergens, ha az előző spektrálsugár 1-nél kisebb. Tehát az $|1 - \omega M| < 1$ megoldásait keressük. Ebből következik az, hogy $0 < \omega < \frac{2}{M}$, hiszen a két határértéknél állna fenn egyenlőség, de a $(0, \frac{2}{M})$ intervallum esetén lesz igaz az egyenlőtlenség. Az optimális paramétert az alábbi egyenlet megoldása adja: $|1 - \omega M| = |1 - \omega m|$.

$$-1 + \omega M = 1 - \omega m$$

$$\omega M + \omega m = 2$$

$$\omega(M+m) = 2$$

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{M+m}$$

Az ehhez kapcsolódó spektrálsugarat a következőképpen számolhatjuk ezután:

$$\rho(B\omega_{\text{opt}}) = 1 - \omega_{\text{opt}} m = \frac{M+m}{M+m} - \frac{2m}{M+m} = \frac{M-m}{M+m}.$$

Megjegyzés. A Richardson-iteráció konvergenciájával kapcsolatos tudnivalók megegyeznek az egyszerű iteráció konvergenciájával.

Példa. Határozzuk meg a következő mátrix esetén a lehetséges ω értékek halmazát, valamint az optimális ω értéket a hozzá tartozó spektrálsugárral!

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

Először kiszámoljuk az A mátrix spektrálsugarát. Ez a legnagyobb abszolútértékű sajátérték. Mivel a mátrix pozitív definit, tudjuk, hogy a sajátértékek pozitívak, ezért az abszolútértékkel nem is kell foglalkozni. Az A mátrix sajátértékei a $(2-x)^2 - 1 = 0$ megoldásai. A sajátértékek: 3 és 1. Ennek megfelelően az A mátrix spektrálsugara 3. Az előző tételt felhasználva a lehetséges ω értékek halmaza: $0 < \omega < \frac{2}{3}$. Az A mátrix legkisebb sajátértéke 1. Felhasználva a tételben szereplő képletet az optimális ω érték: $\frac{2}{3+1}$, vagyis $\frac{1}{2}$. A hozzá kapcsolódó spektrálsugár: $\frac{3-1}{3+1} = \frac{1}{2}$.

4.7. Mikor álljunk le az iterációval?

Ebben az alfejezetben négy leállási feltétel lesz megfogalmazva azzal kapcsolatban, hogy meddig iteráljunk. Ezek közül egyszerre akár többet is alkalmazhatunk.

- 1) Definiálhatunk egy $r^k = b - Ax^k$ hibavektort és nézhetjük a következő hányadost: $\frac{\|r^k\|}{\|r^0\|}$. Amennyiben ez elegendően kicsi, leállhatunk az iterációval.
- 2) Megadhatunk egy maximális iterációs számot, ahol mindenféleképpen abbahagyjuk az iterációt.
- 3) Ha $\|B\| < 1$, akkor alkalmazhatjuk a Banach-féle fixponttételt.

$$\|x^* - x^k\| < \frac{\|B\|^k}{1 - \|B\|} \|x^1 - x^0\|$$

Szeretnénk tudni, hogy hány iterációra van szükség egy adott normabeli pontosság eléréséhez. Ezt megmondhatjuk az első iteráció eredményéből valamint $\|B\|$ értékéből.

- 4) Megnézhetünk két egymás melletti iterációt és ha $\|x^{k+1} - x^k\|$ megfelelően kicsi, akkor nem iterálunk tovább.

4.8. Alkalmazás differenciálegyenletre (peremérték-feladat)

Tekintsük a következő peremérték-feladatot:

$$-u''(t) = f(t)$$

$$u(0) = \mu_1, u(L) = \mu_2$$

Az $f(t)$, μ_1 , μ_2 adottak és ez alapján szeretnénk közelíteni a megoldást véges sok pontban. A $[0, L]$ intervallumot felosztjuk egy adott h lépésköz szerint. A kapott t_i pontokat a következő halmaz írja le:

$$\bar{\omega}_h = \left\{ t_i = ih \mid i = 0 \dots N, h = \frac{L}{N} \right\}$$

A megoldást a belső pontokban keressük, hiszen a perempontokban adva van a megoldás. A belső pontokat a következő halmaz írja le:

$$\omega_h = \left\{ t_i = ih \mid i = 1 \dots N - 1, h = \frac{L}{N} \right\}$$

A belső pontokban a véges differenciák segítségével közelítjük a megoldást. Ehhez szükségünk van a második deriváltra vonatkozó differenciasémára egy adott t_i pontban.

$$u''(t_i) \approx \frac{1}{h^2} (u(t_i + h) - 2u(t_i) + u(t_i - h)) = \frac{1}{h^2} (u(t_{i+1}) - 2u(t_i) + u(t_{i-1}))$$

Jelölje y_i a t_i pontban lévő közelítő megoldásunkat. Az előző differenciaséma alapján y_1 közelítése a következő:

$$y_1 \approx \frac{1}{h^2} (y_0 - 2y_1 + y_2)$$

A differenciálegyenlet megoldásához eljuthatunk egy $A_h y_h = b$ lineáris algebrai egyenletrendszer megoldásával a következők miatt. A feltételből tudjuk, hogy $y_0 = \mu_1$ és $y_N = \mu_2$. Ha minden belső pontra felírjuk a differenciasémát, akkor az A_h mátrix segítségével a következő egyenletrendszer adódna (az előjelek változnak, mert a második derivált előjele a feladatban más, mint a felírt differenciasémában):

$$\frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & -1 & 2 & -1 & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{N-2} \\ y_{N-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(t_1) + \frac{\mu_1}{h^2} \\ f(t_2) \\ \vdots \\ f(t_{N-2}) \\ f(t_{N-1}) + \frac{\mu_2}{h^2} \end{pmatrix}$$

Ennek megoldására rengeteg előzőleg ismertetett direkt és iteratív eljárás létezik. Mivel az együtthatómátrix egyik főminorjának determininása sem 0, így alkalmazható a Gauss módszer, az ingamódszer, a Cramer-szabály (mivel a mátrix négyzetes). Az iteratív eljárások közül alkalmazható a Jacobi és Gauss-Seidel módszer, mert a mátrix szimmetrikus, pozitív definit, illetve M-mátrix.

Példa. Írjuk fel az alábbi peremérték-feladatnak megfelelő lineáris algebrai egyenletrendszert a véges differenciaséma használatával.

$$-u''(t) = 1$$

$$u(0) = 1, u(1) = 2$$

$$h = \frac{1}{4}$$

A megoldást a $t_1 = \frac{1}{4}$, $t_2 = \frac{2}{4}$, $t_3 = \frac{3}{4}$ pontokban keressük. A differenciasémát alkalmazva a következő egyenletrendszert kell megoldani:

$$16 \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 \\ -1 & 2 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(t_1) + \frac{\mu_1}{h^2} = 17 \\ f(t_2) = 1 \\ f(t_{N-1}) + \frac{\mu_2}{h^2} = 33 \end{pmatrix},$$

hiszen $\frac{\mu_1}{h^2} = 16$, $\frac{\mu_2}{h^2} = 32$ és $\frac{1}{h^2} = 16$.

Tehát innentől kezdve a következő egyenletrendszert kell megoldani:

$$32y_1 - 16y_2 = 17$$

$$-16y_1 + 32y_2 - 16y_3 = 1$$

$$-16y_2 + 32y_3 = 33$$

Alkalmazzuk a Cramer-szabályt y_1, y_2, y_3 kiszámolására:

$$y_1 = \frac{\det \begin{pmatrix} 17 & -16 & 0 \\ 1 & 32 & -16 \\ 33 & -16 & 32 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 32 & -16 & 0 \\ -16 & 32 & -16 \\ 0 & -16 & 32 \end{pmatrix}} = \frac{22016}{16384} = 1,34375$$

$$y_2 = \frac{\det \begin{pmatrix} 32 & 17 & 0 \\ -16 & 1 & -16 \\ 0 & 33 & 32 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 32 & -16 & 0 \\ -16 & 32 & -16 \\ 0 & -16 & 32 \end{pmatrix}} = \frac{26624}{16384} = 1,625$$

$$y_3 = \frac{\det \begin{pmatrix} 32 & -16 & 17 \\ -16 & 32 & 1 \\ 0 & -16 & 33 \end{pmatrix}}{\det \begin{pmatrix} 32 & -16 & 0 \\ -16 & 32 & -16 \\ 0 & -16 & 32 \end{pmatrix}} = \frac{30208}{16384} = 1,84375$$

A továbbiakban kiszámoljuk a pontos megoldást, hogy megtudjuk mennyire jó közelítés. Mivel $-u''(t) = 1$, ezért $u(t) = \frac{-t^2}{2} + at + b$. Az $u(0) = 1$ feltételből adódik, hogy $b = 1$. Az $u(1) = 2$ feltételt alkalmazva azt kapjuk, hogy $\frac{-1}{2} + a + 1 = 2$, vagyis $a = 1,5$. Tehát $u(t) = \frac{-t^2}{2} + 1,5t + 1$ és az $\frac{1}{4}, \frac{2}{4}, \frac{3}{4}$ pontokban a következő értékeket kapjuk:

$$u\left(\frac{1}{4}\right) = 1,34375$$

$$u\left(\frac{2}{4}\right) = 1,625$$

$$u\left(\frac{3}{4}\right) = 1,84375$$

Tehát a közelítő megoldás egyben a pontos megoldás is. A valóságban jóval több osztópontot szokás használni, ekkor az egyenletrendszer mérete is nagyobb.

5. Iterációs módszerek: variációs iterációk (szimmetrikus mátrix esete)

A záró fejezetben is az (1) szerinti lineáris algebrai egyenletrendszereket tekintjük. Az utolsó szakaszban bemutatjuk a főbb variációs iterációs módszereket. Ezeket akkor használjuk, amikor az $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ lineáris algebrai egyenletrendszer \mathbf{A} együtthatómátrixa szimmetrikus és pozitív definit. Az alapgondolat az, hogy egy olyan többváltozós függvényt adunk meg, melynek abszolút minimumhelye az egyenletrendszer

megoldása. Ha ez megvan, akkor iteráció segítségével kell megkeresni a minimumhelyet. Az $x \in \mathbb{R}^n$ vektorhoz rendeljük az $f(x) = \frac{1}{2}(x^T A x) - x^T b$ függvényt. Mivel $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ és $x, b \in \mathbb{R}^n$, ezért valóban az történik, hogy minden vektorhoz egy számot rendelünk. Az f függvénynek ott lehet szélsőértéke, ahol a deriváltja 0. Itt $f'(x) = Ax - b$, ahol $f'(x)$ -et gradiensfüggvénynek nevezzük. Tehát az $Ax - b$ kifejezésnek kell 0-nak lennie, ami megfelel annak, mintha megoldanánk az $Ax = b$ egyenletrendszerét. Tehát az előbb definiált $f(x)$ függvénynek az $x = A^{-1}b$ pontban lesz az abszolút minimuma. Az abszolút minimumkeresés alapjául szolgál az egyenes menti keresés, amikor egy pontból egy adott irányba keressük a minimumot. Az iránymenti minimumok megkereséséről a következő tétel szól.

Tétel. ([1]) Legyenek x és $p \neq 0$ vektorok. A $g(\alpha) = f(x + \alpha p)$ egyváltozós függvény egyértelmű minimumát az $\alpha = \frac{p^T r}{p^T A p}$ választás esetén veszi fel, ahol $r = b - Ax$.

A tételben szereplő r vektort maradékvektornak vagy reziduálvektornak nevezzük. Ahogyan látható, az r vektor a gradiens vektor (-1) -szerese és ez megmutatja, hogy mekkora az eltérés az egyenletrendszer két oldala között.

5.1. Gradiens-módszer

A gradiens-módszer alapja az, hogy egy többváltozós függvény a gradiensvektorral ellentétes irányban csökken a leggyorsabban. Az előzőek szerint ez éppen az r reziduálvektor. Gradiens-módszernek nevezzük azt az iterációs eljárást, amikor a reziduálvektort választjuk keresési iránynak, annak érdekében, hogy meghatározhassuk az $f(x)$ minimumhelyét. Az eljárásnál kiindulunk egy x pontból és az r vektor irányába az $x + \left(\frac{r^T r}{r^T A r}\right) r$ pontba lépünk tovább. Innen pedig az alábbi maradékvektor irányába keressük a minimumot: $b - A \left(x + \left(\frac{r^T r}{r^T A r}\right) r\right)$. Az iteráció során az egymás utáni keresések irányai merőlegesek egymásra. Amíg $r_k \neq 0$ addig a következő lépéseket kell végrehajtani, miután választottunk x_0 -t és legyártottuk az $r_0 = b - Ax_0$ vektort:

$$\alpha_k = \frac{r_{k-1}^T r_{k-1}}{r_{k-1}^T A r_{k-1}}$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k r_{k-1}$$

$$r_k = b - A x_k$$

Példa. Tekintsük a következő lineáris egyenletrendszer!

$$\begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

A nullvektorból kiindulva tegyünk meg 2 lépést a gradiens-módszerrel!

Az algoritmust használva $x_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ és $r_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$.

$$\alpha_1 = \frac{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}} = \frac{1}{3}$$

$$x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$r_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/3 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 1/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -1/3 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_2 = \frac{\begin{pmatrix} 0 & -1/3 \\ 0 & -1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1/3 \end{pmatrix}}{\begin{pmatrix} 0 & -1/3 \\ 0 & -1/3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 1 \\ 1 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -1/3 \end{pmatrix}} = \frac{1/9}{4/9} = \frac{1}{4}$$

$$x_2 = \begin{pmatrix} 1/3 \\ 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 0 \\ -1/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ -1/12 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1/3 \\ -1/12 \end{pmatrix}$$

A pontos megoldás: $x = \begin{pmatrix} 4/11 \\ -1/11 \end{pmatrix}$.

A gradiens-módszer hátránya, hogy amennyiben az A mátrix nem jól kondicionált, akkor az alkalmazott módszer lassan konvergál. A nem jól kondicionáltság alatt azt értjük, hogy a $\kappa_2(A) = \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2$ kondíciószám nagy. A következő tétel a gradiens-módszer konvergenciájával kapcsolatos.

Tétel. ([3]) Legyen A szimmetrikus, pozitív definit mátrix. Ekkor tetszőleges x^0 esetén az iteráció lineárisan konvergál és

$$\|x^k - x^*\| \leq \frac{1}{m} \|Ax^0 - b\| \left(\frac{M-m}{M+m}\right)^k,$$

ahol m és M az A mátrix legkisebb és legnagyobb sajátértéke.

5.2. Konjugált gradiens-módszer

Az előző alfejezet végén látható volt, hogy a gradiens módszer konvergálhat lassan is, ha az A mátrix nem jól kondicionált. Emiatt kérdés, hogy lehet-e gyorsabbá tenni a konvergenciát, ha más keresési irányt választunk. A módszer ismertetése előtt szükség lesz arra, hogy két vektort mikor nevezünk A -konjugáltaknak.

Definíció. ([1]) Legyen adva egy $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ szimmetrikus, pozitív definit mátrix. Azt mondjuk, hogy az x és y vektorok A -konjugáltak, ha $x^T A y = 0$.

A konjugált gradiens-módszer esetében úgy választjuk meg a keresési irányt, hogy az A -konjugált legyen az előző keresési irányra. Az iteráció során kiindulunk egy x_0

vektorból és kiszámoljuk az $r_0 = b - Ax_0$ vektort. Kezdetben $p_1 = r_0$. Amíg $r_k \neq 0$, addig a következő számolásokat kell végrehajtani:

$$\alpha_k = \frac{p_k^T r_{k-1}}{p_k^T A p_k}$$

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k$$

$$r_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k$$

$$\beta_k = \frac{p_k^T A r_k}{p_k^T A p_k}$$

$$p_{k+1} = r_k - \beta_k p_k$$

A következő tétel a konjugált gradiens-módszer konvergenciájával kapcsolatos.

Tétel. ([2]) Ha A pozitív definit mátrix, akkor

$$\frac{\|x^k - x^*\|}{\|x^0 - x^*\|} \leq 2 \left(\frac{\sqrt{M} - \sqrt{m}}{\sqrt{M} + \sqrt{m}} \right)^k$$

Példa. Tekintsük a következő parciális differenciálegyenletet!

$$-\Delta u(x, y) = f(x, y)$$

$$u|_{\partial\Omega} = 0$$

$$\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$$

A $-\Delta u(x, y)$ jelölés a következőt jelenti: $-\Delta u(x, y) = -(\partial_x^2 u(x, y) + \partial_y^2 u(x, y))$.

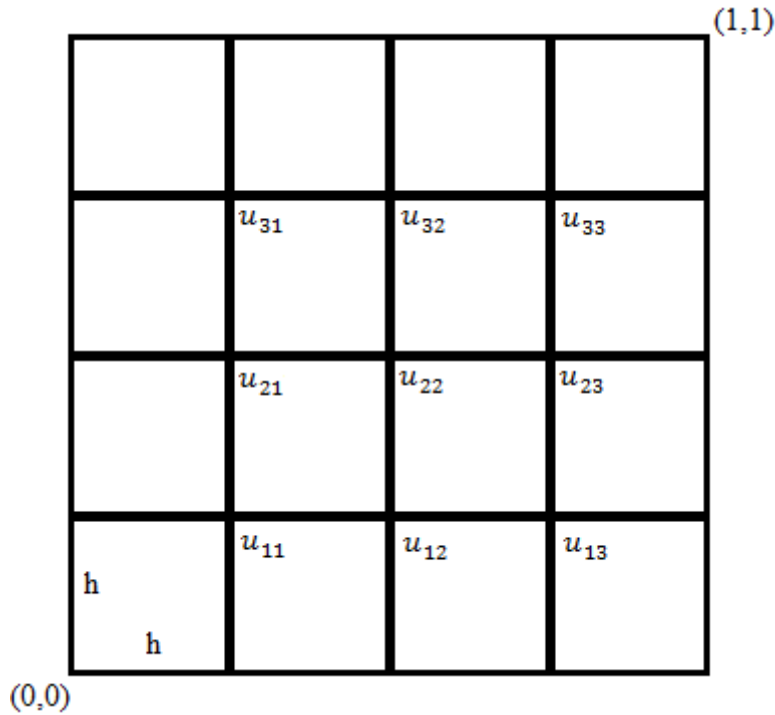
A $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$ feltétel azt jelenti, hogy a tartomány, ahol a feladatot megszeretnénk oldani, az egységnyezet.

A $u|_{\partial\Omega} = 0$ azt jelöli, hogy a peremen a kérdéses $u(x, y)$ kétváltozós függvény értéke 0.

A feladat megoldását véges sok pontban keressük a véges differenciás módszer segítségével. Először definiáljuk a belső pontokat, ahol keressük a megoldást:

$$\omega_h = \left\{ (ih, jh) : i = 1 \dots N, j = 1 \dots N, h = \frac{1}{N+1} \right\}$$

Egy példa arra az esetre, amikor az egységnyezetet mindkét irányban 4 részre osztjuk. Ekkor 9 belső pontunk lesz.



Az u_{32} pontra a következő módon néz ki a differenciaséma ([4]):

$$\begin{aligned} \Delta u(x, y) &= (\partial_x^2 u(x, y) + \partial_y^2 u(x, y)) \approx \frac{1}{h^2} (u_{33} - 2u_{32} + u_{31}) + \frac{1}{h^2} (u_{22} - 2u_{32} + u_{42}) = \\ &= \frac{1}{h^2} (-4u_{32} + u_{33} + u_{31} + u_{22} + 0), \text{ mivel az } u_{42} \text{ ebben az esetben peremponti érték, így} \\ &\quad \text{nullával egyenlő.} \end{aligned}$$

$$-\Delta u(x, y) = -(\partial_x^2 u(x, y) + \partial_y^2 u(x, y)) \approx \frac{1}{h^2} (4u_{32} - u_{33} - u_{31} - u_{22} - 0)$$

A differenciálegyenlet megoldása ekvivalens az $A_h u_h = f_h$ lineáris algebrai egyenletrendszer megoldásával, amennyiben a következők szerint állítjuk össze az A_h mátrixot, u_h és f_h vektorokat. A vektorok esetében az egyes komponensekbe beírjuk a csomópontbeli értékeket. Az u_h vektor esetében az $u(x, y)$, míg az f_h vektornál az $f(x, y)$ megfelelő értékeit. Például a fenti rácsra így néznek ki a vektorok:

$$u_h = \begin{pmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{13} \\ u_{21} \\ u_{22} \\ u_{23} \\ u_{31} \\ u_{32} \\ u_{33} \end{pmatrix}, f_h = \begin{pmatrix} f_{11} \\ f_{12} \\ f_{13} \\ f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ f_{31} \\ f_{32} \\ f_{33} \end{pmatrix}$$

A vektorok mérete természetesen függ a tartomány felosztásától. Az előzőekben 4 részre osztottuk mindkét irányban a tartományt és 9 belső pontunk volt. Emiatt az u_h, f_h vektoroknak 9 sora volt. Ha a felosztás finomabb, akkor a vektorok mérete nő, ellenkező esetben csökken. Az $A_h \in \mathbb{R}^{9 \times 9}$ a következőképpen néz ki:

$$A_h = \frac{1}{h^2} \begin{pmatrix} 4 & -1 & & -1 & & & & & \\ -1 & 4 & -1 & & -1 & & & & \\ & -1 & 4 & \ddots & & -1 & & & \\ -1 & & \ddots & \ddots & & & & & \ddots \\ & -1 & & -1 & & & & & \\ & & & & -1 & & & & \\ & & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & \ddots & & \\ & & & & & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

Az A_h mátrixot a következőképpen is felírhatjuk. Legyen $B, I \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$, ahol B tridiagonális mátrix, I pedig egységmátrix:

$$B = \begin{pmatrix} 4 & -1 & \\ -1 & 4 & -1 \\ & -1 & 4 \end{pmatrix}, I = \begin{pmatrix} 1 & & \\ & 1 & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

$$\text{Ekkor } A_h = \begin{pmatrix} B & -I & \\ -I & B & -I \\ & -I & B \end{pmatrix}, \text{ egy blokk-tridiagonális mátrix.}$$

Természetesen az A_h mátrix mérete is függ a tartomány felosztásától, attól, hogy hány részre osztjuk fel és attól is, hogy a két irányban ugyanolyan lépésközzel (ugyanannyi résszel) dolgozunk. Minél kisebb a lépésköz (minél több részre osztunk), annál nagyobb a vektorok és a mátrix mérete. A vázolt példában ugyanolyan lépésközzel dolgoztunk és 4 részre osztottuk a tartományt mindkét irányban. Általánosan, ha N és M részre osztunk, akkor $(N-1)(M-1)$ belső csomópontunk van. Az u_h, f_h vektorok komponenseinek a száma megegyezik az előbbi számmal. Az A_h mátrix mérete pedig $(N-1)^2 \times (M-1)^2$. Az A_h mátrix a következő jó tulajdonságokkal rendelkezik: szimmetrikus, pozitív definit és M -mátrix. Az M -mátrix definíciójában lévő feltételek teljesül hiszen a főátlón kívül csak 0 és -1 elemek vannak. Ha vesszük azt a $w(x, y) = x(1-x)y(1-y)$ rácsponti értékeiből $g = w_h$ vektort, akkor igaz az, hogy $g > 0$ és $A_h g > 0$ ([4]). Mivel az A_h M -mátrix, így reguláris is. Tekintve, hogy a mátrix szimmetrikus és sajátértékei pozitívak, így pozitív definit is. Az előbb említett tulajdonságokra szerepeltek iterációs módszerek az előző fejezetben, tehát elég lenne azt alkalmazni és megoldani a lineáris algebrai egyenletrendszert.

5.3. Prekondicionált változatok

Az előzőekben szó esett arról, hogy amennyiben az A együtthatómátrix kondíciószáma nagy, akkor különösen a gradiens módszer, de még a konjugált gradiens-módszer is lassan konvergál. Ebben az alfejezetben a prekondicionálással ismerkedünk meg. Az alapötlet az, hogy $Ax = b$ rendszert transzformáljuk egy invertálható B mátrix segítségével. Tehát most már $Ax = b$ helyett a $B^{-1}Ax = B^{-1}b$ feladatot tekintjük. Az a cél, hogy teljesüljön a következő: $\kappa(B^{-1}A) < \kappa(A)$. A $B^{-1}A$ mátrix kondíciószáma akkor a legkisebb, ha $B = A$. Jó prekondicionáló mátrix a B , ha a $B^{-1}A$ mátrix sajátértékei kis intervallumon belül helyezkednek el. További elvárás a B mátrix kapcsán, hogy jól közelítse A -t és az átalakított lineáris algebrai egyenletrendszert könnyebben meg lehessen oldani. Ehhez felbontjuk A -t két mátrix különbségére: $A = B - C$, ahol B prekondicionáló mátrix. Nézzük meg, hogyan néz ki a prekondicionálás néhány klasszikus iterációnál. Az egyszerű iteráció képlete:

$$x^{k+1} = x^k - B^{-1}(Ax^k - b)$$

Ez a képlet átírható a következőképpen:

$$Bx^{k+1} = Bx^k - (Ax^k - b)$$

Felhasználva, hogy $A = B - C$, az alábbi képlet adódik:

$$Bx^{k+1} = Cx^k + b$$

A Jacobi-iteráció esetén a prekondicionáló mátrix a $B = D$, amely az A mátrix főátlójából álló diagonális mátrix. Az iterációra vonatkozó képlet:

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

A Jacobi módszer esetén a következő két részfeladatot kell megoldani:

$$Dz^k = r^k$$

$$x^{k+1} = x^k - z^k$$

$(z^k)_i = \frac{(r^k)_i}{d_i}$, ahol $1 \leq i \leq k$ és $d_i = a_{ii} > 0$. A Gauss-Seidel-iteráció esetén a B prekondicionáló mátrix nem más, mint $L+D$. Ez az A mátrix alsóháromszög része a főátlóval együtt. A Gauss-Seidel-iteráció képlete:

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

Az iteráció lépései:

$$(L+D)z^k = r^k$$

$$x^{k+1} = x^k - z^k$$

A JOR és SOR iterációk esetén egy ω paramétert vezetünk be a gyorsabb konvergencia érdekében. Ezek is prekondicionált iterációk:

$$x^{k+1} = x^k - \omega D^{-1}(A x^k - b) \text{ és}$$

$$x^{k+1} = x^k - \omega(L+D)^{-1}(A x^k - b)$$

Az alfejezet zárásaként megemlítjük az inkomplett LU-felbontás, mint prekondicionáló eljárást. Az algoritmus azon alapszik, hogy amennyiben az A együtthatómátrix tartalmaz 0 elemet, akkor az LU-felbontást úgy hajtjuk végre, hogy ezek az elemek végig nullák maradjanak. Emiatt az eljárás műveletigénye kisebb lesz.

5.4. Nem szimmetrikus vagy nem pozitív definit mátrix esete

Tekintsük az (1) szerinti $Ax = b$ lineáris algebrai egyenletrendszert és tegyük fel az A mátrixról, hogy a szimmetrikus vagy a pozitív definit tulajdonsága sérül. Vegyük a lineáris algebrai egyenletrendszer normálegyenletét, azaz $A^*Ax = A^*b$ feladatot szeretnénk megoldani, ahol A^* az A transzponáltjának konjugáltja. Ha A valós mátrix, akkor $A^* = A^T$, tehát ebben az esetben így módosul a feladat: $A^T Ax = A^T b$. Függetlenül attól, hogy az A mátrix szimmetrikus-e vagy sem, az A^*A mátrix szimmetrikus, pozitív definit. Alkalmazzuk a konjugált gradiens-módszert erre az esetre. Legyen továbbra is r a reziduális vektor és $r_n = Ax_n - b$. A módosított reziduális vektort jelölje s_n és $s_n = A^*(Ax_n - b)$. Az algoritmus a következőképpen épül fel. Legyen x_0 tetszőleges. Ehhez legyártjuk az $r_0 = Ax_0 - b$, valamint az $s_0 = p_0 = A^* r_0$ vektorokat. A következő számolásokat kell elvégeznünk ([3]):

$$z_n = A p_n$$

$$\alpha_n = - \frac{\langle r_n, z_n \rangle}{\|z_n\|^2}$$

$$x_{n+1} = x_n + \alpha_n p_n$$

$$r_{n+1} = r_n + \alpha_n z_n$$

$$s_{n+1} = A^* r_{n+1}$$

$$\beta_n = \frac{\|s_{n+1}\|^2}{\|s_n\|^2}$$

$$p_{n+1} = s_{n+1} + \beta_n p_n$$

A következő parciális differenciálegyenlet visszavezethető olyan lineáris algebrai egyenletrendszer megoldására, melynek együtthatómátrixa nem pozitív definit.


```

I = speye(n);
E = sparse(2:n,1:n-1,1,n,n);
D = E+E'-2*I;
A = -kron(D,I)-kron(I,D);
Auj = A;
A = A/(h^2)- 1*eye(n^2);
b =reshape(f,n^2,1);
%b(1:n:n^2)=b(1:n:n^2)+g'/h^2
Duj = Auj;
u = reshape(zeros(n),n^2,1);
r = A*u-b;
s1 = A*r;
s2 = A*r;
p = A*r;
for k=1:15
    z = Duj\ (A*p);
    alfa = -dot(Duj*r,z) / dot(Duj*z,z);
    umaxnorm(k)= norm(u,inf);
    u = u + alfa*p;
    rmaxnorm(k)= norm(r,inf);
    energianorma(k)= sqrt(dot(Auj*r,r)) ;
    r = r + alfa*z;
    s1= s2;
    s2 = Duj\ (A*r);
    beta = dot(Duj*s2,s2) / dot(Duj*s1,s1);
    p = s2 + beta*p;
    k=k+1;
end
rmaxnorm = rmaxnorm'
energianorma = energianorma'
%umaxnorm = umaxnorm'

function febpremod1(n,l)
h = 1/(n+1);
x=h*[1:n];
y=x;
[xi,yi] = meshgrid(x,y);
g=0;
z = -16*2*(xi.^2-xi+yi.^2-yi);
zs = -16*1*xi.*(1-xi).*(1-yi).*yi;
f = z+zs;
I = speye(n);
E = sparse(2:n,1:n-1,1,n,n);
D = E+E'-2*I;
A = -kron(D,I)-kron(I,D);
Auj = A;
A = A/(h^2)- 1*eye(n^2);
b =reshape(f,n^2,1);

```

```

%b(1:n:n^2)=b(1:n:n^2)+g'/h^2
Duj = diag(diag(Auj));
u = reshape(zeros(n),n^2,1);
r = A*u-b;
s1 = A*r;
s2 = A*r;
p = A*r;
for k=1:100
    z = Duj\ (A*p);
    alfa = -dot(Duj*r,z) / dot(Duj*z,z);
    umaxnorm(k)= norm(u,inf);
    u = u + alfa*p;
    rmaxnorm(k)= norm(r,inf);
    energianorma(k)= sqrt(dot(Auj*r,r)) ;
    r = r + alfa*z;
    s1= s2;
    s2 = Duj\ (A*r);
    beta = dot(Duj*s2,s2) / dot(Duj*s1,s1);
    p = s2 + beta*p;
    k=k+1;
end
rmaxnorm = rmaxnorm'
energianorma = energianorma'
%umaxnorm = umaxnorm'

```

A prekondicionáló mátrix a diszkrét Laplace mátrixa					
reziduálvektor maxnormája			energianorma		
10 osztópont	50 osztópont	100 osztópont	10 osztópont	50 osztópont	100 osztópont
15.6055	15.9816	15.9953	39.6549	82.8973	116.9455
15.1706	15.9661	15.9914	32.2028	59.1789	82.7317
4.2251	10.1298	10.7864	15.2279	30.1768	40.1362
1.0727	4.4715	5.7569	5.4227	14.8432	19.8146
1.2100	1.1202	2.3247	2.7079	6.7083	9.6688
0.5211	0.1802	0.5369	1.3325	2.7026	4.3306
0.0868	0.2841	0.1350	0.4937	1.1717	1.8540
0.0944	0.2039	0.1368	0.2381	0.5737	0.8235
0.0474	0.0907	0.1001	0.1171	0.2782	0.3811
0.0092	0.0216	0.0507	0.0417	0.1250	0.1821
0.0048	0.0097	0.0185	0.0222	0.0552	0.0858
0.0031	0.0037	0.0066	0.0095	0.0262	0.0398
0.0010	0.0020	0.0028	0.0036	0.0123	0.0186
0.0005	0.0007	0.0008	0.0020	0.0054	0.0087
0.0002	0.0005	0.0004	0.0008	0.0023	0.0041

A prekondicionáló mátrix a diszkrét Laplace diagonálisából képzett mátrix					
reziduálvektor maxnormája			energianorma		
10 osztópont	50 osztópont	100 osztópont	10 osztópont	50 osztópont	100 osztópont
15.6055	15.9816	15.9953	39.6549	82.8973	116.9455
15.6628	15.9817	15.9953	35.7179	72.0989	101.7997
15.7179	15.9818	15.9953	34.0359	65.9264	92.9398
16.7679	15.9821	15.9953	35.3366	64.6786	91.6134
17.4886	15.9825	15.9954	33.8376	59.6017	83.6701
17.3812	15.9827	15.9954	34.4605	61.6474	83.4553
16.0499	15.9830	15.9954	36.1719	59.0119	85.8875
14.8038	15.9833	15.9954	35.4890	60.4923	82.8630
12.6274	15.9838	15.9955	35.8246	58.1449	80.0282
9.8594	15.9841	15.9955	31.3629	55.7856	80.2638
9.7457	15.9844	15.9955	29.4352	56.4318	77.2268
9.3438	15.9848	15.9955	30.0103	54.8050	80.8382
11.8088	15.9852	15.9956	36.9143	55.7004	77.3899
11.5352	15.9858	15.9956	42.5354	55.0179	76.1554
11.5212	15.9862	15.9956	43.2953	52.8636	75.7613

6. Irodalomjegyzék

- [1] Faragó István, Horváth Róbert: Numerikus módszerek, Typotex (2013):
<http://tankonyvtar.ttk.bme.hu/pdf/30.pdf>
- [2] Stoyan Gisbert, Takó Galina: Numerikus módszerek 1., Typotex (2005):
<http://www.tankonyvtar.hu/hu/tartalom/tkt/numerikus-modszerek-1/adatok.html>
- [3] Karátson János: Numerikus funkcionálanalízis, Typotex (2014):
<http://etananyag.ttk.elte.hu/download.php?view.77>
- [4] Horváth Róbert, Izsák Ferenc, Karátson János: Parciális differenciálegyenletek numerikus módszerei számítógépes szimulációkkal (2013):
http://www.cs.elte.hu/~karatson/pdnm_vegleges_2013.pdf
- [5] Kiss Emil jegyzete: http://www.cs.elte.hu/~ewkiss/bboard/13o.n/Alg1n_print_5.pdf
- [6] Kiss Emil jegyzete: http://www.cs.elte.hu/~ewkiss/bboard/14t.n/Alg2n_print_2.pdf
- [7] Faragó István: Alkalmazott analízis 1,2 előadásjegyzet

NYILATKOZAT

Név: Várhegyi Bence

ELTE Természettudományi Kar, szak: Matematika BSc

NEPTUN azonosító: O0MFCU

Szakdolgozat címe: Lineáris algebrai egyenletrendszerek direkt és iteratív megoldási módszerei

A **szakdolgozat** szerzőjeként fegyelmi felelősségem tudatában kijelentem, hogy a dolgozatom önálló munkám eredménye, saját szellemi termékem, abban a hivatkozások és idézések standard szabályait következetesen alkalmaztam, mások által írt részeket a megfelelő idézés nélkül nem használtam fel.

Budapest, 2016.05.03.



a hallgató aláírása