8. Základní numerické algoritmy

1. řešení soustav lineárních rovnic - metody přímé a iterační
2. metody řešení nelineárních rovnic
3. interpolace funkcí polynomy
4. jiné metody aproximace funkcí
5. numerická integrace.

1. řešení soustav lineárních rovnic - metody přímé a iterační

a) přímé metody

Řešíme rovnici $Ax = y$, kde $y \in \mathbb{R}^n$ a $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Frobeniova věta: Systém lineárních rovnic má řešení právě tehdy, když hodnost matice A je stejná jako hodnost rozšířené matice systému $(A|y)$.

- základní metody, známé již ze střední a základní školy - dosazovací metoda, sčítací metoda
- Gaussova eliminační metoda
- Cramerovo pravidlo

Cramerovo pravidlo

Předpokládejme, že A je regulární matice, a tedy její hodnost je n. Potom také hodnost rozšířené matice $(A|y)$ je rovna n pro každé $y \in \mathbb{R}^n$.
Označme

$$A_i = \begin{pmatrix} a_{11} & \dots & a_{1i-1} & y_{1i} & a_{1i+1} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & \dots & a_{2i-1} & y_{2i} & a_{2i+1} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \\ a_{n1} & \dots & a_{ni-1} & y_{ni} & a_{ni+1} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Cramerovo pravidlo říká, že rovnice $Ax = y$ má právě jedno řešení x^*, pro které platí:

$$x_i^* = \frac{\det A_i}{\det A}.$$

b) iterační metody

- Jacobiho metoda (jednokrokovoá stacionární iterační metoda)
- Gauss-Seidelova metoda (jednokrokovoá stacionární iterační metoda)
- SOR metoda (relaxační metoda)
- metoda největšího spádu (metoda založená na minimalizaci kvadratické formy)
- metoda sdružených gradientů (metoda založená na minimalizaci kvadratické formy)

Řešíme rovnici $Ax = y$, kde $y \in \mathbb{R}^n$ a $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je regulární matice.

Základní myšlenka iteračních metod:

$$Ax = y \iff bAx = by \iff x + bAx = x + by \iff x = (I - bA)x + by,$$

kde $b \in \mathbb{R}$ je nenulové.
Tedy vektor x^* je řešením rovnice

$$Ax = y$$

právě tehdy, když řeší rovnici

$$x = Tx + r,$$

kde $T = (I - bA), r = by$.

Jednokrokovou stacionární iterační metodou nazveme proces definovaný vztahem

$$x_{k+1} = Tx_k + r,$$

kde $x_0 \in \mathbb{R}$ je daný vektor. Tento proces nazveme konvergentním, pokud

$$x_k \to x^*, \quad \forall x_0 \in \mathbb{R}.$$

Jacobiho metoda

Matici A vyjádříme jako součet 3 matic:
D - diagonální matice,
L - ostře dolní trojúhelníková matice,
U - ostře horní trojúhelníková matice
Dosadíme do rovnice $Ax = y$ a upravíme:

$$Ax = (D + L + U)x = y$$

$$Dx + (L + U)x = y$$

$$Dx = y - (L + U)x$$

$$x = D^{-1}[y - (L + U)x]$$

iterační proces:

$$x^{i+1} = D^{-1}[y - (L + U)x^i]$$

po složkách:

$$x_j^{i+1} = \frac{1}{a_{jj}} \left(y_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk} x_k^i - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk} x_k^i \right), \qquad j = 1, \ldots, n$$

Gauss-Seidelova metoda

Tato metoda je podobná Jacobiho metodě, jen při výpočtu x_j^{i+1} používáme již vypočítané složky $x_1^{i+1}, x_2^{i+1}, \cdots, x_{j-1}^{i+1}$. Tedy:

$$x_j^{i+1} = \frac{1}{a_{jj}} \left(y_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk} x_k^{i+1} - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk} x_k^i \right), \qquad j = 1, \ldots, n$$

Relaxační metody jsou metody pro urychlení konvergence Gauss-Seidelovy metody. Metoda se modifikuje tím, že do iteračního schématu se zavede parametr ω. Iterační matice $T\omega$ tedy závisí na parametru ω, který se nazývá relaxační parametr. Pro správnou volbu tohoto parametru bude mít matice $T\omega$ menší spektrální poloměr $\rho = \max\{|\lambda_1|, |\lambda_2|, \ldots, |\lambda_n|\}$, kde $\lambda_1, \lambda, \ldots, \lambda_n$ značí vlastní čísla matice T, než matice T a iterační proces bude konvergovat rychleji .

SOR (Successive Over-Relaxation)

Iterační proces metody SOR:

$$x_j^{i+1} = (1-\omega)x_j^i + \frac{\omega}{a_{jj}}\left(y_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk}x_k^{i+1} - \sum_{k=j+1}^{n} a_{jk}x_k^i\right), \qquad j = 1, \ldots, n$$

Metody založené na minimalizaci kvadratické formy

Předpokládáme-li, že matice A je symetrická a pozitivně definitní ($(Ax, x) > 0$ pro každé $x \neq 0$), nalezení řešení rovnice $Ax = y$ je ekvivalentní s nalezením minima funkce

$$F(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (y, x).$$

metoda největšího spádu

- zvolme počáteční vektor x_0
- vypočtěme reziduum $r_0 = y - Ax_0$ (vektor největšího spádu)
- určeme hodnotu a_0, pro kterou nabývá funkce $F(x_0 + ar_0)$ svého minima:

$$a_0 = \frac{(r_0, r_0)}{(r_0, Ar_0)}$$

- spočítejme nové přiblížení $x_1 = x_0 + ar_0$ přesného řešení
- vypočtěme nové reziduum $r_1 = r_0 - a_0 Ar_0$
- ...

metoda sdružených gradientů

- podobná jako metoda největšího spádu
- zvolme počáteční vektor x_0
- vypočtěme reziduum $r_0 = y - Ax_0$
- první směrový vektor v_0 zvolme takto $v_0 = r_0$
- spočítejme nové přiblížení $x_1 = x_0 + a_0 v_0$ přesného řešení
- vypočtěme nové reziduum $r_1 = r_0 - a_0 Av_0$
- zvolme další směrový vektor $v_1 = r_1 + b_0 v_0$ tak, aby $(v_1, Av_0) = 0$, platí:

$$b_0 = -\frac{(v_0, Ar_1)}{(v_0, Av_0)}$$

- ...

2. metody řešení nelineárních rovnic

Je dána spojitá funkce f na intervalu $[a,b]$, $f(a)f(b) < 0$. Chceme zjistit, pro které $\alpha \in (a,b)$ platí $f(\alpha) = 0$. (Lagrangeova věta nám zaručuje, že za těchto podmínek takové α existuje.)

- metoda půlení intervalů
- Newtonova metoda (metoda tečen)
- metoda sečen
- Regula falsi

metoda půlení intervalů

$$\boxed{a_0 = a, \quad b_0 = b, \quad n = 0}$$

$$\downarrow$$

$$\boxed{x = \frac{a_n + b_n}{2}}$$

Pokud $f(x) = 0$, $\quad \alpha = x \quad \rightarrow$ konec.
Pokud $f(x) \neq 0$:

$$\boxed{f(a_n)f(x) < 0} \rightarrow \boxed{b_{n+1} = x, \quad a_{n+1} = a_n}$$

$$\boxed{f(a_n)f(x) > 0} \rightarrow \boxed{a_{n+1} = x, \quad b_{n+1} = b_n}$$

Pokud je splněno ukončovací kriterium, $\alpha = x \quad \rightarrow$ konec.
Pokud ne $\boxed{n = n + 1}$

- vždy konverguje

Newtonova metoda (metoda tečen)

- zvolíme počáteční bod x_0
- bodem $(x_0, f(x_0))$ vedeme tečnu t ke grafu funkce f
- rovnie tečny t:

$$t(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$$

- další aproximaci x_1 kořene α dostaneme jako průsečík t a osy x:
$t(x_1) = 0$ právě tehdy, když $f(x_0) + f'(x_0)(x_1 - x_0) = 0$, tedy $x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)}$

metoda sečen

- zkonstruujeme přímku p_0 procházející body $f(x_0), f(x_1)$, kde $x_0 = a, x_1 = b$
- přímka p_0 protne osu x v nějakém bodě x_2
- pokud $f(x_2) = 0$, konec
- v opačném případě zkonstruujeme přímku p_1 procházející body $f(x_2), f(x_1)$
- ...
- ne vždy konverguje

metoda regula falsi

- podobná jako metoda sečen
- rozdíl je v tom, že pokud $f(x_{n+1})$ má stejné znaménko jako $f(x_n)$, konstruujeme v dalším kroku přímku, která prochází body $f(x_{n+1})$ a $f(x_m)$, kde $m < n$ je největší index takový, že $f(x_m)$ a $f(x_{n+1})$ mají opačná znaménka, tedy:
- zkonstruujeme přímku p_0 procházející body $f(a_0), f(b_0)$, kde $a_0 = a, b_0 = b$
- přímka p_0 protne osu x v nějakém bodě x_0
- pokud $f(x_0)$ má stejné znaménko jako $f(a_0)$, volíme $a_1 = x_0, b_1 = b_0$,
- v opačném případě volíme $a_1 = a_0, b_1 = x_0$
- zkonstruujeme přímku p_1 procházející body $f(a_1), f(b_1)$
- ...
- vždy konverguje

3. Interpolace funkcí polynomy

Je dán interval $[a, b]$ a hodnoty funkce f v bodech $x_0, x_1, \ldots, x_n$ pro $n \in \mathbb{N}$ (případně další podmínky). Chceme najít polynom p, pro který platí, že $p(x_i) = f(x_i) \quad \forall i \in 1, \ldots n$.

- Newtonova interpolace
- Lagrangeova interpolace
- Hermitova interpolace

Newtonova interpolace

- Dáno: $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$
- Newtonův interpolační polynom:

$$N_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n(x - x_0)(x - x_1) + \ldots (x - x_{n-1}),$$

$a_0 = f(x_0)$
$f(x_1)$ - poměrné diference 0. řádu
$\vdots$
$f(x_n)$
$a_1 = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} =: f[x_1, x_0]$
$\frac{f(x_2) - f(x_1)}{x_2 - x_1} =: f[x_2, x_1]$ - poměrné diference 1. řádu
$\vdots$
$\frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}} =: f[x_n, x_{n-1}]$

$a_2 = \frac{f[x_2,x_1]-f[x_1,x_0]}{x_2-x_0} =: f[x_2,x_1,x_0]$
$\frac{f[x_3,x_2]-f[x_2,x_1]}{x_3-x_1} =: f[x_3,x_2,x_1]$ - poměrné diference 2. řádu
$\vdots$
$\frac{f[x_n,x_{n-1}]-f[x_{n-1},x_{n-2}]}{x_n-x_{n-2}} =: f[x_n,x_{n-1},x_{n-2}]$
$\vdots$

Lagrangeova interpolace

- stejné počáteční podmínky, stejný výslekek jako u Newtonovy interpolace
- liší se jen konstrukcí polynomu
- Lagrangeův interpolační polynom:

$$L_n(x) = f(x_0)l_0(x) + f(x_1)l_1(x) + \cdots + f(x_n)l_n(x),$$

kde $l_i(x_j) = \delta_{ij}, l_i(x_i) = 1 \forall i = 1, 2, \cdots, n$, jinak je výraz roven 0. Pro polynomy l_i tedy dostáváme:

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

Hermitova interpolace

- Dáno: $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ a $f'(x_0), f'(x_1), \cdots, f'(x_n)$
- hledáme polynom $H(x)$ takový, že $H(x_i) = f(x_i)$ a $H'(x_i) = f'(x_i),\ \ i = 0, \cdots n$.
- máme tedy $2n+2$ podmínek, hledáme polynom stupně nejvýše $2n+1$ ve tvaru:

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n} h_i(x) f(x_i) + \sum_{i=0}^{n} \overline{h_i}(x) f'(x_i),$$

kde $h_i, \overline{h_i}$ jsou polynomy stupně nejvýše $2n+1$, pro které platí:

$$h_i(x_j) = \delta_{ij}, h_i'(x_j) = 0, \qquad \overline{h_i}(x_j) = 0, \overline{h_i'}(x_j) = \delta_{ij}$$

- polynom $h_i(x)$ zapíšeme va tvaru:

$$h_i(x) = (a_i x + b_i) \frac{(x-x_0)^2 (x-x_1)^2 \cdots (x-x_{i-1})^2 (x-x_{i+1})^2 \cdots (x-x_n)^2}{(x_i-x_0)^2 (x_i-x_1)^2 \cdots (x_i-x_{i-1})^2 (x_i-x_{i+1})^2 \cdots (x_i-x_n)^2} =$$
$$= (a_i x + b_i) l_i(x)$$

a z výše uvedených podmínek určíme koeficienty a_i, b_i
- platí:

$$a_i = -2l_i'(x_i)$$
$$b_i = 1 + 2x_i l_i'(x_i)$$

- celkem tedy máme:

$$h_i(x) = [1 - 2(x - x_i) l_i'(x_i)] l_i^2(x_i)$$

- polynom $\overline{h_i}(x)$ zapíšeme va tvaru:

$$\overline{h_i}(x) = c_i(x + x_i)\frac{(x - x_0)^2(x - x_1)^2 \cdots (x - x_{i-1})^2(x - x_{i+1})^2 \cdots (x - x_n)^2}{(x_i - x_0)^2(x_i - x_1)^2 \cdots (x_i - x_{i-1})^2(x_i - x_{i+1})^2 \cdots (x_i - x_n)^2} =$$

$$= c_i(x + x_i)l_i^2(x)$$

a z výše uvedených podmínek určíme koeficienty c_i
- platí:

$$c_i = 1$$

- celkem tedy máme:

$$\overline{h_i}(x) = (x - x_i)l_i^2(x)$$

- po dosazení:

$$H_{2n+1}(x) = \sum_{i=0}^{n}[1 - 2(x - x_i)l_i'(x_i)]l_i^2(x_i)f(x_i) + \sum_{i=0}^{n}(x - x_i)l_i^2(x)f'(x_i)$$

4. Jiné metody aproximace funkcí

Podobně jako u interpolace je dán interval $[a, b]$ a hodnoty funkce f v bodech $x_0, x_1, \ldots, x_n \in [a, b]$ pro $n \in \mathbb{N}$. Tentokrát není úkolem najít funkci, která bude všemi zadanými body přímo procházet, ale najít funkci dostatečně jednoduchou, která se bude v jistém smyslu nejvíce blížit funkčním hodnotám $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ v bodech $x_0, x_1, \ldots, x_n$ mezi všemi funkcemi nějakého typu.

Metoda nejmenších čtverců

- určíme třídu C funkcí, mezi kterými budeme přiblížení hledat (nepř. lineární funkce, kvardatické funkce, ...)
- hledáme takovou funkci $g \in C$, že součet druhých mocnin rozdílů funkčních hodnot funkcí f a g v bodech $x_0, x_1, \ldots, x_n$ bude minimální
- snažíme se tedy minimalizovat výraz

$$\sum_{i=0}^{n}(f(x_i) - g(x_i))^2$$

5. Numerická integrace

- proces přibližného výpočtu integrálu (přesnou hodnotu integrálu neumíme spočítat nebo je to náročné)
- dána funkce f (analyticky nebo přibližně tabulkou) na intervalu $[a, b]$
- chceme určit přibližnou hdnotu integrálu

$$\int_a^b f(x)dx$$

Lichoběžníková metoda

- rozdělíme interval $[a, b]$ body $x_0, x_1, \ldots, x_n$ na n stejných intervalů nebo máme dělení dáno tabulkou
- určíme funkční hodnoty $f(x_0), f(x_1), \ldots, f(x_n)$ nebo jsou opět dány tabulkou
- na každém intervalu $[x_{i-1}, x_i]$ nahradíme funkci f lineární funkcí $a_i + b_i x$ spojující body $f(x_{i-1}), f(x_i)$
- přibližnou hodnotu $\int_a^b f(x)dx$ pak spočítáme jako součet integrálů těcho lineárních funkcí:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} \int_{x_{i-1}}^{x_i} (a_i + b_i x)dx$$