Yhtälöryhmän iteratiivinen ratkaiseminen

V. V. I. Berg

Matematiikan pro gradu

Jyväskylän yliopisto
Matematiikan ja tilastotieteen laitos
Kesä 2015

Tiivistelmä: V. V. I. Berg, *Yhtälöryhmän iteratiivinen ratkaiseminen* (engl. *Iterative solving of linear system*), matematiikan pro gradu -tutkielma, 35 s., Jyväskylän yliopisto, Matematiikan ja tilastotieteen laitos, kesä 2015.

Tämän kirjoitelman tarkoituksena on näyttää eri ratkaisumenetelmiä lineaarisen yhtälöryhmän

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

ratkaisemiseksi iteratiivisesti ja osoittaa miksi kyseiset menetelmät toimivat ja millä ehdoilla. Kirjoitelmassa käydään läpi Jacobin menetelmä, Gaussin ja Seidelin menetelmä ja konjugaattigradienttimenetelmä.

Edellä mainittua yhtälöryhmää vastaa matriisiyhtälö $Ax = b$, missä $A = A_{n\times n}$ on kompleksikertoiminen neliömatriisi. Jacobin menetelmällä hajotetaan matriisi A osiin diagonaalimatriisiksi D ja matriisiksi $-E-F$, jonka diagonaalialkiot ovat nollia, ja $A = D - E - F$. Tällöin saadaan matriisiyhtälö sellaiseen muotoon, että voidaan iteroida vektorille x^m ratkaisuja alkioittain käyttämällä laskuissa pelkästään edellistä ratkaisua x^{m-1}.

Gaussin ja Seidelin menetelmässä lähtökohta on sama kuin Jacobin menetelmässä. Ero Jacobin menetelmään on siinä, että vektorin alkion x_j^m ratkaisua iteroitaessa käytetään kyseisen iteraatiokierroksen saatujen arvojen $x_1^m, \cdots, x_{j-1}^m$ lisäksi edelliseltä kierrokselta arvoja $x_j^{m-1}, \cdots, x_n^{m-1}$. Tällöin Gaussin ja Seidelin menetelmä näyttäisi olevan laskennallisesti tehokkaampi kuin Jacobin menetelmä.

Konjugaattigradienttimenetelmässä etsitään neliömuodon $f(x) = \frac{1}{2}x^*Ax - b^*x$ gradientin $\nabla f(x) = Ax - b$ nollakohtaa kun A on itseadjungoitu ja positiivisesti definiitti. Kirjoitelmassa lähdetään liikkeelle jyrkimmän laskun menetelmästä, jossa käytetään tietoa siitä, että gradientti vähenee voimakkaimmin negatiivisen gradientin suuntaan, jolloin kyseisen suuntavektorin ja neliömuodon leikkauspiste on jokaisen iteraatiokierroksen ratkaisu vektoriksi x^m. Tämän jälkeen parannetaan jyrkimmän laskun menetelmää etsimällä yleisiä keskenään ortogonaalisia A-konjugaatteja suuntavektoreita p_k. Lopuksi määritellään tapa määrittää eksaktisti etsintäsuuntavektorit käyttämällä Krylovin aliavaruuksia, jolloin päädytään konjugaattigradienttimenetelmään.

Kirjoitelman lopussa arvioidaan empiirisesti kahden esimerkin avulla menetelmien laskennallista tehokkuutta. Pienten matriisien tapauksissa näyttäisi konjugaattigradienttimenetelmä olevan tehokkaampi kuin Jacobin menetelmä ja Gaussin ja Seidelin menetelmä.

Sisältö

Johdanto

Tämän kirjoitelman tarkoituksena on näyttää eri ratkaisumenetelmiä lineaarisen yhtälöryhmän

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

ratkaisemiseksi tai approksimoimiseksi iteratiivisesti ja osoittaa miksi kyseiset menetelmät toimivat ja millä ehdoilla. Kirjoitelmassa käydään läpi Jacobin menetelmä, Gaussin ja Seidelin menetelmä ja konjugaattigradienttimenetelmä.

Esitietoina oletetaan tunnetuiksi peruslineaarialgebran kurssit. Lähdeluettelossakin mainituilta matriisiteorian [**3**] ja matriisiseminaarin [**4**] kurssien käsitellyistä asioista esitellään ensimmäisessä kappaleessa tarpeellinen esitieto. Kirjoitelmassa käsiteltävät matriisit ovat kompleksikertoimisia neliömatriiseja $M \in \mathbb{C}(n, n)$. Myöhemmin kirjoitelmassa käytetään kompleksikertoimisten neliömatriisien joukolle merkintää $\mathbb{M}_n(\mathbb{C})$. Kirjoitelmassa mainitaan erikseen mikäli matriisit ovat jotain muuta. Lisäksi mikäli matriisia kerrotaan vektorilla, matriisia matriisilla tai vektoria vektorilla, niin oletuksena on laskutoimitusten yhteensopivuus dimensioiden suhteen.

Ensimmäisessä kappaleessa esitellään jo peruslineaarialgebran kursseilla käydyistä asioista ominaisarvoteoriaa. Tämän jälkeen esitellään matriisiteoria ja -seminaarikursseilla esitelty määritelmä matriisijonolle ja esitellään matriisin ominaisuuksista itseadjungoituvuus, pseudoinverttisyys, similaarisuus ja matriisinormi, joka johdetaan kompleksisen vektoriavaruuden normista matriisille sopivan ehdon avulla. Lisäksi kappaleessa käsitellään vektorijoukon ortogonaalisuus, ortogonaaliprojektio ja matriisin normaalius.

Toisessa kappaleessa käsitellään Jacobin menetelmä ja Gaussin ja Seidelin menetelmä. Jacobin menetelmällä hajotetaan matriisi summamatriisiksi, jonka toinen osa on diagonaalimatriisi ja toinen osa matriisiksi, jonka diagonaalialkiot ovat nollia. Tällöin saadaan matriisiyhtälö sellaiseen muotoon, että voidaan iteroida ratkaisuvektorin arvoja alkioittain käyttämällä laskuissa pelkästään edellistä ratkaisua. Gaussin ja Seidelin menetelmässä lähtökohta on sama kuin Jacobin menetelmässä. Ero Jacobin menetelmään on kuitenkin siinä, että ratkaisuvektorin arvoja iteroitaessa käytetään aina tuoreimpia arvoja eli kyseisen iteraatiokierroksen saatujen arvojen lisäksi tarvittaessa edelliseltä kierrokselta saatuja arvoja. Toinen kappale pohjautuu vahvasti Denis Serren Matrices: Theory and Applications [**2**] teokseen ja osittain myös Gene H. Golubin ja Charles F. Van Loanin Matrix computations [**1**] teokseen.

Konjugaattigradienttimenetelmässä etsitään neliömuodon $f(x) = \frac{1}{2}x^*Ax - b^*x$ gradientin $\nabla f(x) = Ax - b$ nollakohtaa kun A on itseadjungoitu ja positiivisesti definiitti. Kirjoitelmassa lähdetään liikkeelle jyrkimmän laskun menetelmästä, jossa käytetään tietoa siitä, että gradientti vähenee voimakkaimmin negatiivisen gradientin suuntaan, jolloin kyseisen suuntavektorin ja neliömuodon leikkauspiste on jokaisen iteraatiokierroksen ratkaisu vektoriksi x^m. Tämän jälkeen parannetaan jyrkimmän laskun menetelmää etsimällä yleisiä keskenään ortogonaalisia A-konjugaatteja suuntavektoreita p_k. Lopuksi määritellään tapa määrittää eksaktisti etsintäsuuntavektorit käyttämällä Krylovin aliavaruuksia, jolloin päädytään konjugaattigradienttimenetelmään. Kolmas kappale pohjautuu suurimmilta osin Gene H. Golubin ja Charles F. Van Loanin Matrix computations [**1**] teokseen. Normien osalta painotus on kuitenkin Denis Serren Matrices: Theory and Applications [**2**] teoksessa. Kuvaajien osalta lähteenä on käytetty Jonathan R. Shewchukin An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain [**5**] teosta ja jyrkimmän laskun menetelmän yhteydessä gradientin voimakkaimman vähenemisen osalta on viitattu Robert A. Adamsin Calculus: A Complete Course [**6**] teokseen.

LUKU 1

Lineaarialgebrasta ja matriisiteoriasta

Tässä kappaleessa esitetään iteraatiomenetelmissä käytävien asioiden kannalta oleellisimpia esitietoja todistuksineen tai viittauksineen todistuksiin.

1.1. Matriisin ominaisarvo

Lineaarikuvaukselle $L : V \to V$, missä V on sisätuloavaruus, jollekin luvulle λ ja vektorilla $v \in V$, $v \neq 0$, on voimassa ominaisarvoyhtälö

$$L(v) = \lambda v,$$

missä λ on kuvauksen L *ominaisarvo* ja v siihen liittyvä *ominaisvektori.* Äärellisulotteista lineaarikuvausta L vastaa yksikäsitteisesti neliömatriisi $A = A_{n\times n}$, jolloin määritellään ominaisarvo λ ja ominaisvektori v vastaavalla matriisiyhtälöllä

$$Av = \lambda v. \tag{1.1}$$

Tämä saadaan muodostettua lauseeksi:

LAUSE 1.1. *Luku λ on matriisin $A = A_{n\times n}$ ominaisarvo täsmälleen silloin, kun se toteuttaa matriisin A karakteristisen yhtälön*

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

TODISTUS. Yhtälö (1.1) toteutuu, kun

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

Sellainen ratkaisu, missä $v \neq 0$ löytyy vain, jos kuvaus $A - \lambda I$ ei ole injektio. Tämä on yhtäpitävää sen kanssa, että $A - \lambda I$ ei ole kääntyvä, eli $\det(A - \lambda I) = 0$ □

Matriisin A ominaisarvojen joukkoa sanotaan sen *spektriksi* ja käytetään sille merkintää $\sigma(A)$.

Matriisin $A = A_{n\times n}$ *spektraalisäde* on luku

$$\rho(A) = \max\{\|\lambda\|, \lambda \in \sigma(A)\}.$$

Otettaessa huomioon myös mahdolliset kompleksiset ominaisarvot spektri sisältyy sen spektraalisäteiseen suljettuun kiekkoon eli $\sigma(A) \subset \overline{B}(0, \rho(A))$.

Matriisin ominaisarvojen määrittämistä tarvitaan erityisesti matriisin normin määrityksessä.

1.2. Matriisijono

Olkoon $(A_k)_{k=0}^{\infty}$, missä $A_k = [a_{i,j}^k]$ on äärellisulotteinen matriisi, jono matriiseja. Matriisijono (A_k) suppenee kohti matriisia $A = [a_{i,j}]$, jos suppeneminen tapahtuu alkioittain eli jos $a_{i,j}^k \to a_{i,j}$. Tällöin voidaan käyttää merkintää

$$\lim_{k\to\infty} A_k = A, \text{ tai}$$
$$A_k \to A, \text{ kun } k \to \infty.$$

LAUSE 1.2. *Suppeneville matriisijonoille $A_k \to A$ ja $B_k \to B$, suppenevalle lukujonolle $\lambda_k \to \lambda$ ja kääntyvälle matriisille C pätevät seuraavat ominaisuudet:*

$$A_k + B_k \to A + B \tag{1}$$
$$A_k B_k \to AB \tag{2}$$
$$\lambda_k A_k \to \lambda A \tag{3}$$
$$C^{-1} A_k C \to C^{-1} AC. \tag{4}$$

TODISTUS. Olkoot matriisijonot $A_k = [a_{i,j}^k]$ ja $B_k = [b_{i,j}^k]$, sekä kääntyvä matriisi $C = [c_{i,j}]$ ja matriisien A ja B alkiot $a_{i,j}^k \to a_{i,j}$ ja $b_{i,j}^k \to b_{i,j}$.

Kohta (1): Koska matriisien A_k ja B_k yhteenlasku on alkioittain yhteenlaskua, niin ne suppenevat alkioittain, eli

$$(A_k + B_k)_{i,j} = a_{i,j}^k + b_{i,j}^k \to a_{i,j} + b_{i,j} = (A+B)_{i,j}.$$

Kohta (2): Matriisitulon $A_k B_k$ alkiolle paikassa (i,j) on

$$\sum_{l=1}^{n} a_{i,l}^k b_{l,j}^k \to \sum_{l=1}^{n} a_{i,l} b_{l,j},$$

sillä matriisijonojen A_k ja B_k alkioittaisen suppenevuuden perusteella $a_{i,l}^k \to a_{i,l}$ ja $b_{l,j}^k \to b_{l,j}$ eli myös matriisien tulo suppenee alkioittain.

Kohta (3): Koska matriisin A_k ja skalaarin λ kertolaskussa kerrotaan matriisin A_k alkioita skalaarilla λ, niin

$$(\lambda A_k)_{i,j} = \lambda a_{i,j}^k \to \lambda a_{i,j} = (\lambda A)_{i,j},$$

eli matriisin ja skalaarin tulossa alkioittainen suppeneminen säilyy.

Kohta(4) Seuraa suoraan kohdasta (2). □

Matriisijonon suppeneminen on erittäin olennaista iteratiivisen ratkaisun löytämiseksi.

1.3. Ortogonaalisuudesta ja aliavaruuksista

Äärellinen vektorijoukko V on *ortogonaalinen*, jos sen vektorit ovat pareittain kohtisuorassa toisiaan vastaan. Olkoon vektorit $s \in V$ ja $v \in V$ ortogonaalisen vektorijoukon jäseniä. Tällöin niiden sisätulo antaa nollan eli $(s|v) = s^* v = 0$. Jos ortogonaalisen vektorijoukon V vektorit ovat yksikkövektoreita eli $\|v\| = 1$ kaikilla $v \in V$, niin vektorijoukko V on *ortonormaali*. Jos vektorijoukko V muodostaa sisätuloavaruuden, niin sillä on ortonormaali kanta [**3**, s. 31].

Osajoukot S ja T ovat ortogonaaliset, jos $(s|t) = 0$ kaikilla $s \in S$ ja $t \in T$. Osajoukon $S \subset V$ *ortogonaalikomplementti* on aliavaruus

$$S^{\perp} = \{s \in V \mid (x|s) = 0 \text{ kaikilla } s \in S\}.$$

Olkoon vektorijoukko $\{v_1, ..., v_n\} \subset \mathbb{R}^m$. Joukkoa kaikista vektorijoukon lineaarikombinaatioista merkitään

$$\operatorname{span}\{v_1, ..., v_n\} = \{\sum_{j=1}^{n} \beta_j v_i : \beta_j \in \mathbb{R}\}.$$

Jos V on avaruuden $\mathbb{R}^m$ aliavaruus eli $V \subseteq \mathbb{R}^m$, niin on olemassa lineaarisesti riippumattomat kantavektorit $\{v_1, ..., v_n\} \subset V$ siten, että $V = \operatorname{span}\{v_1, ..., v_n\}$. Aliavaruuden V kantavektoreiden lukumäärälle eli *dimensiolle* käytetään merkintää $\dim(V)$. Olkoon $v = \lambda_1 v_1 + \cdots + \lambda_n v_n, \lambda_j \in \mathbb{R}$. Samaistamalla tämä vektori sarakevektorin kanssa, saadaan $[v_1, v_2, \cdots, v_n]^T \leftrightarrow (v_1, v_2, \cdots, v_n) \in \mathbb{R}^n$. Tällöin matriisin A yhteys lineaarikuvaukseen $L : V \to V$ saadaan samaistetun sarakevektorin v avulla

$$Lv = Av.$$

Käyttämällä samaistettuja sarakevektoreita matriisi saadaan sarakehajotelmamuotoon $A = [a_1, ..., a_n]$, jolloin sen *sarakeavaruus* $\operatorname{ran}(A) = \operatorname{span}\{a_1, ..., a_n\}$ ja sen *ranki* $\operatorname{rank}(A) = \dim(\operatorname{ran}(A))$.

Määritellään vielä *ortogonaaliprojektio*, joka on lineaarikuvaus $P : V \to V$, jolle $P^2 = P$ on projektio kuvauksen P kuvajoukolta $\operatorname{Im}(P)$ kuvauksen P *ytimen* eli aliavaruuden $\operatorname{Ker}(P)$ suuntaan, jos $\operatorname{Ker}(P) \perp \operatorname{Im}(P)$. Ortogonaaliprojektiolle P pätee $\operatorname{Im}(P) = U \Rightarrow \operatorname{Ker}(P) = U^{\perp}$, missä U on avaruuden V aliavaruus.

1.4. Matriisin eräitä ominaisuuksia

Käsitellään tutkielmassa käytettyjä matriisin ominaisuuksia, joita ei ole käsitelty johdannon alussa mainituilla kursseilla tai ovat muuten oleellisia tutkielman kannalta.

MÄÄRITELMÄ 1.3. Olkoon kompleksikertoiminen $n \times n$ neliömatriisi $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$. Matriisi A on *itseadjungoitu*, jos se on itsensä konjugaattitranspoosi eli $A = \overline{A^T}$ ja sen alkioille $a_{i,j} = \overline{a_{ji}}$. Käytetään tälle merkintää A^*.

MÄÄRITELMÄ 1.4. Olkoon kompleksikertoiminen $n \times n$ neliömatriisi $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$. Matriisi X on matriisin A *pseudoinverssi*, jos pätee seuraavat ehdot:

$$\begin{aligned} AXA &= A \\ XAX &= X \\ (AX)^* &= AX \\ (XA)^* &= XA. \end{aligned}$$

Tällöin sekä AX, että XA ovat itseadjungoituja. Käytetään matriisin A pseudoinverssille merkintää A^+ (ks. [**1**, s. 257–288]).

Jos $\mathrm{rank}(A) = n$, niin $n \times m$ matriiseille $A^+ = (A^*A)^{-1}A^*$ ja $n \times n$ neliömatriiseille on $A^+ = A^{-1}$. Lisäksi AA^+ ja A^+A ovat ortogonaaliprojektioita sarakeavaruuksiin $\mathrm{ran}(A)$ ja $\mathrm{ran}(A^*)$.

MÄÄRITELMÄ 1.5. Neliömatriisit A ja B ovat *similaareja* toistensa suhteen, jos on olemassa kääntyvä matriisi P, jolle pätee $A = PBP^{-1}$ (ks. [**2**, s. 9] ja [**1**, s. 311]).

Tutkitaan seuraavaksi similaarien matriisien ominaisarvoja.

LAUSE 1.6. *Jos neliömatriisit A ja B ovat similaarit, niin niillä on sama karakteristinen polynomi ja samat ominaisarvot monikertoineen.*

TODISTUS. Jos $A = PBP^{-1}$, niin

$$\begin{aligned}\det(A - \lambda I) &= \det(PBP^{-1} - \lambda PP^{-1}) \\ &= \det(P(B - \lambda)P^{-1}) \\ &= \det(P)\det(B - \lambda)\det(P^{-1}) \\ &= \det(B - \lambda I).\end{aligned}$$

□

MÄÄRITELMÄ 1.7. Olkoon kompleksikertoiminen $n \times n$ neliömatriisi $A \in M(n, n, \mathbb{C})$. Matriisi A on *unitaarinen*, jos $A^{-1} = A^*$.

Neliömatriisi on unitaarinen täsmälleen silloin, kun sen rivivektorit ovat *ortonormaalit* ja kun sen sarakevektorit ovat ortonormaalit.

MÄÄRITELMÄ 1.8. Matriisi A on *normaali*, jos sillä on normaali ominaiskanta avaruudessa $\mathbb{C}^n$, eli jos matriisin ominaisvektorit muodostavat avaruuden $\mathbb{C}^n$ kannan ja kantavektoreiden pituudet ovat ykkösiä.

Matriisi A on normaali silloin, kun $A^*A = AA^*$(ks. [**2**, s. 313]. Mikäli matriisi A on normaali, niin on olemassa unitaarinen matriisi U niin, että $A = UDU^*$, missä D on diagonaalimatriisi (ks. [**3**, s. 36] ja [**2**, s. 28–29]). Tällöin matriisit A ja D ovat similaarit ja siten niiden ominaisarvot ovat samat.

1.5. Normi

MÄÄRITELMÄ 1.9. Kuvaus $\|\cdot\| : V \to \mathbb{R}$ on *normi* kompleksisessa vektoriavaruudessa V, jos kaikilla $x, y \in V$ ja $w \in \mathbb{C}$ pätee

(1) $\|x\| \geq 0$ ja $\|x\| = 0$ jos ja vain jos $x = \overline{0}$
(2) $\|wx\| = |w|\,\|x\|$
(3) $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$.

Kompleksisen vektoriavaruuden $\mathbb{C}^n$ normeja ovat mm.

$$\begin{aligned}\|x\|_1 &= |x_1| + \cdots + |x_n| = \sum_{i=1}^{n} |x_i| \\ \|x\|_p &= (\sum_{i=1}^{n} |x|^p)^{\frac{1}{p}}, \text{ kun } p > 1 \\ \|x\|_\infty &= \max\{|x_1|, \ldots, |x_n|\}.\end{aligned}$$

TODISTUS. Siihen, että edellä mainitut normit toteuttavat normin ehdot, tarvitaan Minkowskin epäyhtälöä ja Hölderin epäyhtälöä. Minkowskin epäyhtälö on

$$\|x+y\|_p \leq \|x\|_p + \|y\|_p$$

kaikilla $x, y \in \mathbb{C}^n$. Hölderin epäyhtälö on

$$|(x,y)| \leq \|x\|_p \|y\|_{p'},$$

missä yhtälön

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{p'} = 1$$

lukuja p ja p' sanotaan *konjugaattieksponenteiksi.* Näiden todistukset löytyvät Serren kirjasta [**2**, s. 61–63].

Olkoon vektorit x ja $y \in \mathbb{C}^n$ ja $w \in \mathbb{C}$. Tarkastellaan aluksi normia $\|\cdot\|_1$. Selvästi jos $x = \overline{0}$, niin $\|x\|_1 = 0$. Edelleen jos jokin vektorin x komponentti $x_i \neq 0$, niin $\|x\|_1 > 0$. Lisäksi

$$\|wx\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |wx_i| = |w| \sum_{i=1}^{n} |x_i| = |w| \|x\|_1 .$$

Lopuksi

$$\|x+y\|_1 = \sum_{i=1}^{n} |x_i + y_i| \leq \sum_{i=1}^{n} |x_i| + \sum_{i=1}^{n} |y_i| = \|x\|_1 + \|y\|_1 .$$

Seuraavaksi tarkastellaan normia $\|\cdot\|_p$. Selvästi jos $x = \overline{0}$, niin $\|x\|_p = 0$. Edelleen jos jokin vektorin x alkio $x_i \neq 0$, niin $\|x\|_p > 0$. Lisäksi

$$\begin{aligned}
\|wx\|_p &= (\sum_{i=1}^{n} |wx_i|^p)^{\frac{1}{p}} \\
&= (|w|^p \sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}} \\
&= (|w|^p)^{\frac{1}{p}} (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}} \\
&= |w| \|x\|_p .
\end{aligned}$$

Koska $p > 1$, niin

$$\begin{aligned}
|x_i + y_i|^p = |x_i + y_i||x_i + y_i|^{p-1} &\leq (|x_i| + |y_i|)|x_i + y_i|^{p-1} \\
&= |x_i||x_i + y_i|^{p-1} + |y_i||x_i + y_i|^{p-1}.
\end{aligned}$$

Jos $q = \frac{p}{p-1}$, niin $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, $\frac{1}{p} = 1 - \frac{1}{q}$ ja $(p-1)q = p$. Tällöin Hölderin epäyhtälöllä saadaan

$$\sum_{i=1}^{n} |x_i||x_i + y_i|^{p-1} \leq (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}} (\sum_{i=1}^{n} |x_i + y_i|^{(p-1)q})^{\frac{1}{q}}$$

ja

$$\sum_{i=1}^{n} |y_i||x_i+y_i|^{p-1} \leq (\sum_{i=1}^{n} |y_i|^p)^{\frac{1}{p}} (\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^{(p-1)q})^{\frac{1}{q}}.$$

Nyt

$$\begin{aligned}
&(\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^p)^{\frac{1}{p}} = (\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^p)^{1-\frac{1}{q}} = \frac{\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^p}{(\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^p)^{\frac{1}{q}}} \\
&\leq \frac{(\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}} (\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^{(p-1)q})^{\frac{1}{q}} + (\sum_{i=1}^{n} |y_i|^p)^{\frac{1}{p}} (\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^{(p-1)q})^{\frac{1}{q}}}{(\sum_{i=1}^{n} |x_i+y_i|^{(p-1)q})^{\frac{1}{q}}} \\
&= (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^p)^{\frac{1}{p}} + (\sum_{i=1}^{n} |y_i|^p)^{\frac{1}{p}}.
\end{aligned}$$

Tarkastellaan vielä normia $\|\cdot\|_\infty$. Selvästi jos $x = \overline{0}$, niin $\|x\|_\infty = 0$. Edelleen jos jokin vektorin x alkio on nollasta poikkeava eli $x_i \neq 0$, niin $\|x\|_\infty > 0$. Lisäksi

$$\|wx\|_\infty = \max\{|wx_1|, \cdots, |wx_n|\} = |w| \max\{|x_1|, \cdots, |x_n|\} = |w| \, \|x\|_\infty$$

ja lopulta

$$\begin{aligned}
\|x+y\|_\infty &= \max\{|x_1+y_1|, \cdots, |x_n+y_n|\} \leq \max\{|x_1|+|y_1|, \cdots, |x_n|+|y_n|\} \\
&\leq \max\{|x_1|, \cdots, |x_n|\} + \max\{|y_1|, \cdots, |y_n|\} = \|x\|_\infty + \|y\|_\infty .
\end{aligned}$$

Siispä annetut normit toteuttavat normin ehdot.

□

Vektoriavaruuden normien ehdot eivät kuitenkaan riitä matriiseille. Määritellään siis erikseen ehto matriisinormille.

MÄÄRITELMÄ 1.10. Kuvausta $\|\cdot\| : \mathbb{M}_n(\mathbb{C}) \to \mathbb{R}$ kutsutaan *matriisinormiksi*, jos matriiseille $A, B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$ pätee

$$\|AB\| \leq \|A\| \, \|B\| . \tag{1.2}$$

Kirjoitelmassa oleellisin matriisinormi on operaattorinormi tai indusoitu matriisinormi. Olkoon nyt vektoriavaruus $\mathbb{C}^n$ varustettu normilla $\|\cdot\|_v$. Tämän normin indusoima matriisinormi määritellään asettamalla

$$\|A\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} = \max_{\|x\|_v} \|Ax\|_v \tag{1.3}$$

kaikille $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$. Tarkistetaan, että indusoidulle matriisinormille pätee määritelmän 1.9 ehdot normille ja matriisinormin ehto.

(1) Olkoon vektori $z \in \mathbb{C}^n$, jolle $\|z\|_v = 1$ ja $\|A\| = \|Az\|_v$. Tällöin kaikille vektoreille $x \in \mathbb{C}^n$, joille $\|x\|_v = 1$, on $\|Ax\|_v \leq \|Az\|_v$. Jos $A = 0$, niin $0 = \|Ax\|_v \leq \|Az\|_v$ kaikille $x \in \mathbb{C}^n$, jolloin $\|A\| = 0$. Jos $\|A\| = \|Az\|_v = 0$, niin $A = 0$.

(2) Olkoon $c \in \mathbb{C}^n$.

$$\|cA\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|cAx\|_v}{\|x\|_v} = \sup_{x \neq 0} \frac{|c| \, \|Ax\|_v}{\|x\|_v} = |c| \sup_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_v}{\|x\|_v} = |c| \, \|A\| .$$

(3) Olkoon $x \neq 0$. Nyt

$$\frac{\|(A+B)x\|_v}{\|x\|_v} = \frac{\|Ax+Bx\|_v}{\|x\|_v} \leq \frac{\|Ax\|_v + \|Bx\|_v}{\|x\|_v} \leq \|A\| + \|B\|.$$

Tällöin

$$\|A+B\| \leq \|A\| + \|B\|.$$

(4) Olkoon $Bx = y \neq 0$. Tällöin

$$\begin{aligned}
\|AB\| &= \sup_{x\neq 0} \frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v} \\
&= \sup_{x\neq 0, Bx\neq 0} \frac{\|ABx\|_v}{\|Bx\|_v} \frac{\|Bx\|_v}{\|x\|_v} \\
&\leq \sup_{y\neq 0} \frac{\|Ay\|_v}{\|y\|_v} \sup_{x\neq 0} \frac{\|Bx\|_v}{\|x\|_v} \\
&= \|A\| \, \|B\|.
\end{aligned}$$

Toisaalta jokaiselle x, jolle $Bx = 0$ on

$$\frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v} = 0 \leq \sup_{x\neq 0, Bx\neq 0} \frac{\|ABx\|_v}{\|x\|_v},$$

jolloin epäyhtälö pätee myös toiseen suuntaan.

Lause 1.11. *Aikaisemmin annettujen normien indusoimat matriisinormit ovat:*

$$\|A\|_1 = \sum_{i,j=1}^{n} |a_{i,j}| \tag{1.4}$$

$$\|A\|_p = (\sum_{i,j=1}^{n} |a_{i,j}|^p)^{\frac{1}{p}}, \text{ kun } p > 1 \tag{1.5}$$

$$\|A\|_\infty = \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{i,j}|. \tag{1.6}$$

Todistus. Tarkistetaan, että edellä mainitut matriisinormit täyttävät matriisinormin ehdon (1.10).

Olkoon $A, B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$ siten, että $A = [a_{i,j}]$ ja $B = [b_{i,j}]$. Nyt saadaan normille (1.4)

$$\begin{aligned}
\|AB\|_1 &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |(AB)_{i,j}| = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \left| \sum_{k=1}^{n} a_{i,k} b_{k,j} \right| \\
&\leq \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k} b_{k,j}| \leq \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{m=1}^{n} |a_{i,k} b_{m,j}| \\
&= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{m=1}^{n} |a_{i,k}||b_{m,j}| = (\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}|)(\sum_{j=1}^{n}\sum_{m=1}^{n} |b_{m,j}|) \\
&= \|A\|_1 \, \|B\|_1.
\end{aligned}$$

Normia (1.5) eli *p-normia* varten todistetaan aluksi, että p-normifunktio $\|\cdot\|_p$ on vähenevä muuttujan $p \in \mathbb{R}^n$ suhteen. Olkoon p ja $q \in \mathbb{R}^n$ siten, että $0 < p < q$ ja vektori $x \in \mathbb{C}^n$. Jos $x = 0$, niin $\|x\|_p = \|x\|_q$ ja väite pätee. Jos $x \neq 0$, niin olkoon komponentti $y_k = \frac{|x_k|}{\|x\|_q}$. Tällöin $y_k \leq 1$ jokaiselle $k = 1, \cdots, n$ ja $y_k^p \geq y_k^q$. Siis $\|y\|_p \geq 1$, jolloin $\|x\|_p \geq \|x\|_q$ ja p-normifunktio on vähenevä.

Nyt saadaan Hölderin epäyhtälöstä

$$\begin{aligned}\left|\sum_{k=1}^{n} a_{i,k}b_{k,j}\right|^p &\leq (\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}b_{k,j}|)^p \leq ((\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}|^p)^{\frac{1}{p}}(\sum_{k=1}^{n} |b_{k,j}|^q)^{\frac{1}{q}})^p \\ &= ((\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}|^p)^{\frac{1}{p}}(\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}|^q)^{\frac{p-1}{p}})^p = (\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}|^p)(\sum_{k=1}^{n} |b_{k,j}|^q)^{p-1},\end{aligned}$$

missä $q = \frac{p}{p-1}$, niin $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$, $\frac{1}{p} = 1 - \frac{1}{q}$ ja $(p-1)q = p$.

Saadaan

$$\begin{aligned}\|AB\|_p &= (\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |(AB)_{i,j}|^p)^{\frac{1}{p}} = (\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \left|\sum_{k=1}^{n} a_{i,k}b_{k,j}\right|^p)^{\frac{1}{p}} \\ &\leq ((\sum_{k=1}^{n} |\sum_{i=1}^{n} a_{i,k}|^p) \sum_{j=1}^{n}(\sum_{k=1}^{n} |b_{k,j}|^q)^{p-1})^{\frac{1}{p}} \\ &\leq ((\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}|^p)(\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |b_{k,j}|^q)^{p-1})^{\frac{1}{p}} \\ &= (\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} |a_{i,k}|^p)^{\frac{1}{p}}(\sum_{k=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} |b_{k,j}|^q)^{\frac{1}{q}} \\ &= \|A\|_p \|B\|_q \leq \|A\|_p \|B\|_p .\end{aligned}$$

Normille (1.6) on taas

$$\begin{aligned}\|AB\|_\infty &= \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |\sum_{k=1}^{n} a_{k,j}b_{i,k}| \leq \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} |a_{k,j}b_{i,k}| \\ &\leq \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{i,j}b_{i,j}| = \max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{i,j}||b_{i,j}| \\ &\leq \max_{1\leq i\leq n} (\sum_{j=1}^{n} |a_{i,j}| \sum_{k=1}^{n} |b_{i,k}|) \leq (\max_{1\leq i\leq n} \sum_{j=1}^{n} |a_{i,j}|)(\max_{1\leq i\leq n} \sum_{k=1}^{n} |b_{i,k}|) \\ &= \|A\|_\infty \|B\|_\infty .\end{aligned}$$

Tällöin jokainen normi täyttää matriisinormin ehdon. □

Eräs käyttökelpoinen matriisinormin (1.5) erikoistapaus on euklidisen normin $\|\cdot\|_2$ indusoima spektraalinormi (ks. [**2**, s. 65] ja [**1**, s. 57])

$$\|A\|_2 = \sqrt{\rho(A^*A)}.$$

LAUSE 1.12. *Olkoon $\|\cdot\|$ avaruuden $\mathbb{C}^n$ normi ja kääntyvä neliömatriisi $P \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$. Siten $N(x) := \|Px\|$ on normi avaruudessa $\mathbb{C}^n$. Tällöin $N(A) = \|PAP^{-1}\|$.*

TODISTUS. Olkoon $y = Px$. Nyt

$$N(A) = sup_{x\neq 0}\frac{\|PAx\|}{\|Px\|} = sup_{y\neq 0}\frac{\|PAP^{-1}y\|}{\|y\|} = \left\|PAP^{-1}\right\|.$$

□

LAUSE 1.13 (Householderin lause). *Jokaiselle matriisille $B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$ ja jokaiselle $\epsilon > 0$ on olemassa avaruuden $\mathbb{C}^n$ normi siten, että indusoitu normi*

$$\|B\| \leq \rho(B) + \epsilon. \tag{1.7}$$

TODISTUS. Oletetaan tunnetuksi (ks. [**2**, s. 29–30]), että jokaiselle $B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$ on olemassa kääntyvä neliömatriisi P siten, että $T = PBP^{-1}$ on yläkolmiomatriisi.

Indusoiduille normeille pätee $\rho(A) \leq \|A\|$(ks. [**2**, s. 66]), sillä on olemassa ominaisvektori x, joka vastaa itseisarvoltaan suurinta ominaisarvoa eli matriisin A spektraalisädettä $\rho(A)$ ja jolloin

$$\rho(A)\|x\| = \|\lambda x\| = \|Ax\| \leq \|A\|\|x\|.$$

Nyt matriisit B ja T ovat similaarit ja lauseesta 1.6 johtuen matriiseilla B ja T on sama spektraalisäde, jolloin $\|B\|_2 = \|T\|_2$. Edelleen löydetään matriisin T similaari diagonaalimatriisi $D = \text{diag}(t_1, \cdots, t_n)$ (ks. [**2**, s. 48]). Olkoon kääntyvä neliömatriisi $Q \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$ siten, että $Q(y) = \text{diag}(1, y, y^2, \cdots, y^{n-1})$. Tällöin $\lim_{y\to\infty} Q(y)TQ(y)^{-1} = D$.

Käyttämällä euklidisen normin $\|\cdot\|_2$ indusoimaa matriisinormia saadaan

$$\inf\|T\| = \left\|\lim_{y\to\infty} Q(y)TQ(y)^{-1}\right\|_2 = \|D\|_2 = \sqrt{\rho(D^*D)} = \max|t_i| = \rho(T).$$

□

Householderin lauseella on seuraava seuraus potenssijonojen suppenevuuteen.

SEURAUS 1.14. *Olkoon matriisi $B \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$. Matriisijono $B^k \to 0$, kun $k \to \infty$, jos ja vain jos $\rho(B) < 1$.*

TODISTUS. Todistetaan aluksi, että matriisijonon B_k suppenevuudesta seuraa se, että myös matriisijono $B_k v \to 0$, kun $k \to \infty$, kaikilla vektoreilla $v \in \mathbb{C}^n$. Tämä seuraa suoraan epäyhtälöstä

$$\|B_k v\| \leq \|B_k\|\|v\|.$$

Jos nyt $\rho(B) \geq 1$, niin on olemassa vektori u ja luku λ siten, että

$$Bu = \lambda u.$$

Tällöin myös $B_k u = \lambda_k u$ ja

$$\|B_k u\| = |\lambda_k|\|u\|$$
$$|\lambda_k|\|u\| = \|B_k\|\|u\|,$$

eli kun matriisijono $B_k \to 0$, kun $k \to \infty$, pitäisi myös $\lambda_k \to 0$, kun $k \to \infty$, mutta se on oletuksen vastaista. Siis $\rho(B) < 1$.

Jos taas $\rho(B) < 1$, niin Householderin lauseen nojalla jokaisella $\epsilon > 0$ on

$$\|B_k\| \leq \|B\|_k \leq \rho(B) + \epsilon.$$

Tällöin matriisijono $B_k \to 0$, kun $k \to \infty$. $\square$

LUKU 2

Jacobin ja Gaussin ja Seidelin iteratiiviset menetelmät

Lineaarinen systeemi on muotoa $Ax = b$. Yleisesti hajottamalla matriisi A muotoon $M - N$ ja sillä oletuksella, että M on kääntyvä, saadaan vektoriksi

$$x = M^{-1}(Nx + b).$$

Nyt jono $(x^m)_{m\in\mathbf{N}}$ saadaan induktiivisesti kun

$$x^{m+1} = M^{-1}(Nx^m + b). \tag{2.1}$$

MÄÄRITELMÄ 2.1. Matriisin suppenemisehto:

Olettaen, että matriisit A ja M ovat kääntyviä, $A = M - N$, sanotaan että iteratiivinen metodi (2.1) on suppeneva mikäli jokaiselle parille $(x^0, b) \in \mathbb{C}^n \times \mathbb{C}^n$ on

$$\lim_{m\to\infty} x^m = A^{-1}b.$$

Tästä päästään ehtoon iteratiivisen metodin suppenevuudelle:

LAUSE 2.2. *Iteratiivinen metodi* (2.1) *on suppeneva jos ja vain jos spektraalisäde*

$$\rho(M^{-1}N) < 1.$$

TODISTUS. Olkoon x_0 alkuvektori. Nyt

$$\begin{aligned}
x^1 &= M^{-1}(Nx^0 + b) = M^{-1}Nx^0 + M^{-1}b \\
x^2 &= M^{-1}(Nx^1 + b) = M^{-1}Nx^1 + M^{-1}b \\
&= M^{-1}N(M^{-1}Nx^0 + M^{-1}b) + M^{-1}b = (M^{-1}N)^2x^0 + M^{-1}NM^{-1}b + M^{-1}b \\
x^3 &= M^{-1}(Nx^2 + b) = M^{-1}Nx^2 + M^{-1}b \\
&= M^{-1}N((M^{-1}N)^2x^0 + M^{-1}NM^{-1}b + M^{-1}b) + M^{-1}b \\
&= (M^{-1}N)^3x^0 + (M^{-1}N)^2M^{-1}b + M^{-1}NM^{-1}b + M^{-1}b.
\end{aligned}$$

Näin ollen voidaan päätellä, että vektori

$$x^{m+1} = (M^{-1}N)^m x^0 + \sum_{k=0}^{m-1}(M^{-1}N)^k M^{-1}b.$$

Todistetaan tämä induktiolla. Induktio-oletus on

$$x^k = (M^{-1}N)^{k-1}x^0 + \sum_{i=0}^{k-2}(M^{-1}N)^i M^{-1}b$$

ja induktioväite on

$$x^{k+1} = (M^{-1}N)^k x^0 + \sum_{i=0}^{k-1} (M^{-1}N)^i M^{-1} b.$$

Todistetaan induktioväite sijoittamalla yhtälöön (2.1) induktio-oletuksen vektori x^k, niin saadaan

$$\begin{aligned} x^{k+1} &= M^{-1}(Nx^k + b) \\ &= M^{-1}(N((M^{-1}N)^{k-1}x^0 + \sum_{i=0}^{k-2}(M^{-1}N)^i M^{-1}b) + b) \\ &= (M^{-1}N)^k x^0 + M^{-1}(N \sum_{i=0}^{k-2}(M^{-1}N)^i M^{-1}b) + M^{-1}b \\ &= (M^{-1}N)^k x^0 + \sum_{i=0}^{k-1}(M^{-1}N)^i M^{-1}b, \end{aligned}$$

eli induktioväite on tosi.

Jos $\rho(M^{-1}N) < 1$, on olemassa matriisinormi $\|\cdot\|$ siten, että $\|M^{-1}N\| < 1$, jolloin potenssijono $(M^{-1}N)^m$ suppenee kohti nollamatriisia ja sarja $\sum_{i=0}^{k-1}(M^{-1}N)^i$ suppenee geometrisenä sarjana kohti $(I - M^{-1}N)^{-1}$, jolloin

$$\sum_{i=0}^{k-1}(M^{-1}N)^i M^{-1}b \to \sum_{k=0}^{\infty}(M^{-1}N)^k M^{-1}b = (I - M^{-1}N)^{-1}M^{-1}b.$$

Merkitään $y = (I - M^{-1}N)^{-1}M^{-1}b$, jolloin

$$M^{-1}b = (I - M^{-1}N)y = y - M^{-1}Ny,$$

$b = My - Ny = Ay$ ja $y = A^{-1}b$. Tällöin $x^m \to 0 + A^{-1}b$.

Jos taas $\rho(M^{-1}N) < 1$, niin seurauksen (1.14) nojalla $\lim_{m\to\infty} M^{-1}N = 0$. Tällöin $x^m - A^{-1}b = (M^{-1}N)^m(x^0 - A^{-1}b) \to 0$ ja iteratiivinen metodi on suppeneva.

Jos metodi on suppeneva ja $b = 0$, niin $\lim_{m\to\infty}(M^{-1}N)^m x^0 = 0$ jokaiselle $x^0 \in \mathbb{C}^n$, jolloin myös $\lim_{m\to\infty}(M^{-1}N)^m = 0$. Seurauksen (1.14) nojalla $\rho(M^{-1}N) < 1$.

□

Määritetään raja-arvo $\lim_{m\to\infty} x^m$ iteroimalla Jacobin menetelmällä ja Gaussin ja Seidelin menetelmällä.

2.1. Jacobin iterointimenetelmä

Olkoon $n \times n$ matriisi A jaettu sen diagonaaliosaan D, jonka alkiot ovat nollasta poikkeavia, yläkolmiomatriisiksi $-F$ ja alakolmiomatriisiksi $-E$. Valitaan nyt $M = D$ ja $N = E + F$ ja saadaan iteraatiomatriisiksi $J := D^{-1}(E + F)$. Tarkastellaan yhtälöä $Ax = b$, missä $A = A_{n\times n}$ yleisessä tapauksessa:

$$Ax = b$$
$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}.$$

Jaetaan matriisi A diagonaaliosaan

$$D = \begin{bmatrix} a_{1,1} & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & a_{n,n} \end{bmatrix}$$

ja matriisiksi

$$-E - F = \begin{bmatrix} 0 & a_{1,2} & \cdots & a_{1,3} \\ a_{2,1} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n} \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix}.$$

Nyt $A = D - E - F$ ja yhtälö $Ax = b$ saadaan muotoon

$$x = D^{-1}(b + (E + F)x).$$

Koska yhtälöiden vasemmalla ja oikealla puolella olevat termit ovat samat, niin huomataan, että

$$x = D^{-1}(b + (E + F)x)$$
$$(x^m)_{m=1}^{\infty} = (D^{-1}(b + (E + F)x^m))_{m=1}^{\infty},$$

jolloin yhtälö on induktiivisessa muodossa

$$x^{m+1} = D^{-1}(b + (E + F)x^m).$$

Voidaan approksimoida vektorijonoa aina vektorijonon edellisen jäsenen avulla. Jacobin menetelmä toimii siten, että kun tunnetaan vektori x^m, niin saadaan ratkaistua vektorin x^{m+1} alkio x_i^{m+1}

$$x_i^{m+1} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^m - \sum_{j=i+1}^{n} a_{i,j} x_j^m \right). \tag{2.2}$$

Tutkitaan Jacobin iterointimenetelmää suppenemisehdon avulla, kun $b = 0$. Nyt siis matriisi A on muotoa $A = M - N = D - E - F$, missä matriisi D on matriisin A diagonaali ja matriisit $-E$ ja $-F$ ovat sen ylä- ja alakolmiomatriisit ja riittää tutkia matriisin $D^{-1}(E+F)$ spektraalisädettä. Käyttämällä normin $\|\cdot\|_\infty$ indusoimaa matriisinormia saadaan

$$
\begin{aligned}
\rho(D^{-1}(E+F)) &\leq \left\|D^{-1}(E+F)\right\|_\infty \\
&= \left\| \begin{bmatrix} \frac{1}{a_{11}} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{a_{nn}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & \cdots & a_{1,n} \\ a_{21} & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & a_{n-1,n} \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n-1} & 0 \end{bmatrix} \right\|_\infty \\
&= \max_{1\leq i\leq j} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \left|\frac{a_{i,j}}{a_{i,i}}\right|.
\end{aligned}
$$

Matriisi A on diagonaalisesti dominoiva kun sen alkioille pätee

$$
|a_{i,i}| \geq \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{i,j}| \tag{2.3}
$$

kaikille i. Vastaavasti on kyse aidosta dominoituvuudesta, kun epäyhtälö on aito. Nyt siis aidosti diagonaalisesti dominoivalle matriisille

$$
\max_{1\leq i\leq j} \sum_{j=1, j\neq i}^{n} \left|\frac{a_{i,j}}{a_{i,i}}\right| < 1. \tag{2.4}
$$

Esimerkiksi tapauksessa (2.4) jokaisen matriisin A rivin i diagonaalialkion $a_{i,i}$ itseisarvon täytyy olla suurempi kuin muiden sen rivin alkioiden itseisarvojen summa. Ehto (2.3) takaa sen, milloin vähintään Jacobin menetelmä toimii.

Neliömatriisin $A = A_{3\times 3}$ tapauksessa matriisiyhtälö on muotoa

$$
Ax = b
$$

$$
\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}
$$

ja vektorin x^{m+1} alkioista saadaan muodostettua yhtälöryhmä

$$
\begin{cases}
x_1^{m+1} = \frac{1}{a_{11}}(b_1 - a_{12}x_2^m - a_{13}x_3^m) \\
x_2^{m+1} = \frac{1}{a_{22}}(b_2 - a_{21}x_1^m - a_{13}x_3^m) \\
x_3^{m+1} = \frac{1}{a_{33}}(b_3 - a_{31}x_1^m - a_{32}x_2^m)
\end{cases}.
$$

Esimerkki 2.3. Olkoon yhtälöryhmä

$$
\begin{cases}
5x_1 - 2x_2 + 3x_3 & = -1 \\
-3x_1 + 9x_2 + x_3 & = 2 \\
2x_1 - x_2 - 7x_3 & = 3
\end{cases}
$$

Tätä vastaa matriisiyhtälö

$$
\begin{bmatrix} 5 & -2 & 3 \\ -3 & 9 & 1 \\ 2 & -1 & -7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.
$$

Jacobin menetelmällä saadaan iteraatiokierroksen $m+1$ vektoriksi

$$x^{m+1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{5}(-1 + 2x_2^m - 3x_3^m) \\ \frac{1}{9}(2 + 3x_1^m - x_3^m) \\ \frac{1}{-7}(3 - 2x_1^m + x_2^m) \end{bmatrix}.$$

Alkuarvauksella $x^0 = \begin{bmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ x_3^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ saadaan ensimmäisen iteraatiokierroksen jälkeen vektoriksi

$$x^1 = \begin{bmatrix} \frac{1}{5}(-1 + 2(0) - 3(0)) \\ \frac{1}{9}(2 + 3(0) - (0)) \\ \frac{1}{-7}(3 - 2(0) + (0)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{5} \\ \frac{2}{9} \\ -\frac{3}{7} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -0.2000 \\ 0.2222 \\ -0.4286 \end{bmatrix}.$$

Toisella iteraatiokierroksella saadaan

$$x^2 = \begin{bmatrix} \frac{1}{5}(-1 + 2x_2^1 - 3x_3^1) \\ \frac{1}{9}(2 + 3x_1^1 - x_3^1) \\ \frac{1}{-7}(3 - 2x_1^1 + x_2^1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{5}(-1 + 2(\frac{2}{9}) - 3(-\frac{3}{7})) \\ \frac{1}{9}(2 + 3(-\frac{1}{5}) - (-\frac{3}{7})) \\ \frac{1}{-7}(3 - 2(-\frac{1}{5}) + (\frac{2}{9})) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{46}{315} \\ \frac{64}{315} \\ -\frac{-181}{315} \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 0.1460 \\ 0.2032 \\ -0.5175 \end{bmatrix}.$$

Taulukoimalla iteraatiokierroksia saadaan taulukko

n	x_1^n	x_2^n	x_3^n
1	−0.2000	0.2222	−0.4286
2	0.1460	0.2032	−0.5175
3	0.1917	0.3284	−0.4159
4	0.1809	0.3323	−0.4207
5	0.1854	0.3293	−0.4244
6	0.1863	0.3312	−0.4226
7	0.1861	0.3313	−0.4226
8	0.1861	0.3312	−0.4227
9	0.1861	0.3312	−0.4227

Yhdeksännen kierroksen jälkeen $\|x^9 - x^8\| < 0.001$ ja saadaan ratkaisun approksimaatioksi

$$x = \begin{bmatrix} 0.1861 \\ 0.3313 \\ -0.4226 \end{bmatrix}$$

ESIMERKKI 2.4. Olkoon yhtälöryhmää

$$\begin{cases} \frac{1}{10}x_1 - 2x_2 + 3x_3 & = -1 \\ -3x_1 + 9x_2 + x_3 & = 2 \\ 2x_1 - x_2 - 7x_3 & = 3 \end{cases}$$

vastaava matriisiyhtälö

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{10} & -2 & 3 \\ -3 & 9 & 1 \\ 2 & -1 & -7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Ehdon (2.4) perusteella huomataan, että matriisi ei ole diagonaalisesti dominoiva, koska $\frac{1}{10} < |-2| + |3| = 5$. Ehto ei kuitenkaan poissulje sitä mahdollisuutta, että matriisi silti suppenisi, joten tutkitaan matriisiyhtälöä Jacobin menetelmällä alkuarvauksella

$$x^0 = \begin{bmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ x_3^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Jacobin menetelmällä iteroimalla saadaan taulukko

n	x_1^n	x_2^n	x_3^n
1	-10.00	0.22	-0.42
2	7.30	-3.06	-3.31
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
7	71.72	19.78	17.02
8	-125.11	22.23	17.23
9	-82.35	-43.39	-39.35
10	302.61	-22.85	-17.75

Huomataan, että iteraatiokierrosten määrän kasvaessa vektorijonon (x^m) arvot alkavat oskilloimaan voimakkaasti hajaantuen jolloin jono ei suppene.

2.2. Gaussin ja Seidelin iterointimenetelmä

Olkoon $n \times n$ matriisi A jaettu sen diagonaaliosaan D, jonka alkiot ovat erisuuria kuin nolla, yläkolmiomatriisiksi $-F$ ja alakolmiomatriisiksi $-E$. Nyt yhtälö $Ax = b$ saadaan samaan muotoon kuin Jacobin iteraatiomenetelmässä, eli

$$Ax = (D - E - F)x = b.$$

Gaussin ja Seidelin iterointimenetelmällä käytetään aina tuoreinta laskettua arvoa kunkin vektorin laskemiseksi. Kun tunnetaan vektori x^m, niin saadaan laskettua vektori

$$x_i^{m+1} = \frac{1}{a_{i,i}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{i,j} x_j^{m+1} - \sum_{j=i+1}^{j=n} a_{i,j} x_j^m \right). \tag{2.5}$$

Esimerkki 2.5. Olkoon yhtälöryhmä

$$\begin{cases} 5x_1 - 2x_2 + 3x_3 = -1 \\ -3x_1 + 9x_2 + x_3 = 2 \\ 2x_1 - x_2 - 7x_3 = 3. \end{cases}$$

Tätä vastaa matriisiyhtälö

$$\begin{bmatrix} 5 & -2 & 3 \\ -3 & 9 & 1 \\ 2 & -1 & -7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Olkoon alkuarvaus $x^0 = \begin{bmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ x_3^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$. Gaussin ja Seidelin menetelmällä

$$x_1^1 = \tfrac{1}{5}(-1 + 2x_2^0 - 3x_3^0) = -0,2$$

$$x_2^1 = \tfrac{1}{9}(2 + 3x_1^1 - x_3^0) \approx 0,1556$$

$$x_3^1 = \tfrac{1}{-7}(3 - 2x_1^1 + x_2^1) \approx -0,5079.$$

Taulukoimalla iteraatiokierroksia saadaan taulukko

n	x_1^n	x_2^n	x_3^n
1	-0.2000	0.1556	-0.5079
2	0.1670	0.3343	-0.4286
3	0.1909	0.3335	-0.4217
4	0.1864	0.3312	-0.4226
5	0.1861	0.3312	-0.4227
6	0.1861	0.3312	-0.4227

.

Kuuden iteraation jälkeen $\|x^{m+1} - x^m\| < 0.001$, jolloin saadaan ratkaisuksi

$$x = \begin{bmatrix} 0,1861 \\ 0,3313 \\ -0,4226 \end{bmatrix}.$$

Esimerkki 2.6. Olkoon yhtälöryhmää

$$\begin{cases} 3x_1 + x_3 + ix_3 & = -i \\ x_1 + ix_1 + x_3 & = 3 \end{cases}$$

vastaava matriisiyhtälö

$$\begin{bmatrix} 3 & 1+i \\ 1-i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 10 \end{bmatrix}.$$

Alkuarvauksella

$$x^0 = \begin{bmatrix} x_1^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

saadaan Jacobin menetelmällä iteroimalla taulukko

n	x_1^n	x_2^n
1	$-0.3333 + 0.0000i$	$5.0000 + 0.0000i$
2	$-2.0000 - 1.6667i$	$5.1667 - 0.1667i$
3	$-2.1111 - 1.6667i$	$6.8333 - 0.1667i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
14	$-2.9986 - 2.4989i$	$7.7465 - 0.2499i$
15	$-2.9988 - 2.4989i$	$7.7487 - 0.2499i$
16	$-2.9995 - 2.4996i$	$7.7488 - 0.2500i$

Ehdolla $\|x^{15} - x^{16}\| < 0.001$ saadaan ratkaisun approksimaatioksi

$$x = [-2.9995 - 2.4996i, 7.7488 - 0.2500i].$$

Vastaava taulukko Gaussin ja Seidelin menetelmällä

n	x_1^n	x_2^n
1	$-0.3333 + 0.0000i$	$5.1667 - 0.1667i$
2	$-2.1111 - 1.6667i$	$6.8889 - 0.2222i$
3	$-2.7037 - 2.2222i$	$7.4630 - 0.2407i$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
8	$-2.9988 - 2.4989i$	$7.7488 - 0.2500i$
9	$-2.9996 - 2.4996i$	$7.7496 - 0.2500i$
10	$-2.9999 - 2.4999i$	$7.7499 - 0.2500i$

Ehdolla $\|x^{10} - x^{9}\| < 0.001$ saadaan ratkaisun approksimaatioksi

$$x = [-2.9999 - 2.4999i, 7.7499 - 0.2500i].$$

Huomataan ensinnäkin, että jopa yksinkertaiset kompleksikertoimiset matriisit vaativat reaalikertoimisia enemmän iteraatioita ja että Jacobin menetelmä vaatii noin kaksinkertaisen määrän iteraatioita Gaussin ja Seidelin menetelmään nähden.

LUKU 3

Konjugaattigradienttimenetelmä

Konjugaattigradienttimenetelmä on eräs menetelmä, jolla voidaan ratkaista lineaarisia yhtälöryhmiä. Tässä kappaleessa esitellään aluksi matriisin neliömuoto ja jyrkimmän laskun menetelmä, jolla approksimoidaan neliömuodon minimiä gradientin avulla lineaarisen yhtälön ratkaisemiseksi. Sen jälkeen parannetaan menetelmää A-konjugaattien etsintäsuuntien avulla ja kehitetään sitä käyttökelpoiseksi konjugaattigradienttimenetelmäksi.

3.1. Matriisin neliömuoto

Matriisin A *neliömuoto* on

$$f(x) = x^*Ax = \sum_{i,j}^{n} a_{i,j}\overline{x}_i x_j. \tag{3.1}$$

Mikäli matriisi A on itseadjungoitu, niin matriisi A ja sen kompleksikonjugaatin transpoosi A^* ovat samat, eli $A = A^*$.

MÄÄRITELMÄ 3.1. Olkoon matriisi A itseadjungoitu neliömatriisi. Jos kaikille $x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0$ on

(1) $x^*Ax > 0$, on matriisi A *positiivisesti definiitti* ja käytetään tälle merkintää $A > 0$.
(2) $x^*Ax \geq 0$, on matriisi A *positiivisesti semidefiniitti* ja käytetään tälle merkintää $A \geq 0$.
(3) $x^*Ax < 0$, on matriisi A *negatiivisesti definiitti* ja käytetään tälle merkintää $A < 0$.
(4) $x^*Ax \leq 0$, on matriisi A *negatiivisesti semidefiniitti* ja käytetään tälle merkintää $A \leq 0$.

Jos matriisi ei ole mikään edellisistä, niin se on *indefiniitti* matriisi. Tutkitaan seuraavaksi itseadjungoidun matriisin A spektriä eli sen ominaisarvojen joukkoa.

Matriisin neliömuodosta (3.1) ja yhtälöstä (1.1) saadaan

$$x^*Ax = x^*\lambda_i x = \lambda_i x^*x.$$

Nyt saadaan ominaisarvoille lauseke

$$\lambda_i = \frac{x^*Ax}{x^*x}. \tag{3.2}$$

Huomataan, että jokaiselle $\lambda_i \in \sigma(A)$ pätee

(1) $\lambda_i > 0$ jokaiselle i jos ja vain jos $A > 0$.
(2) $\lambda_i \geq 0$ jokaiselle i jos ja vain jos $A \geq 0$.
(3) $\lambda_i < 0$ jokaiselle i jos ja vain jos $A < 0$.

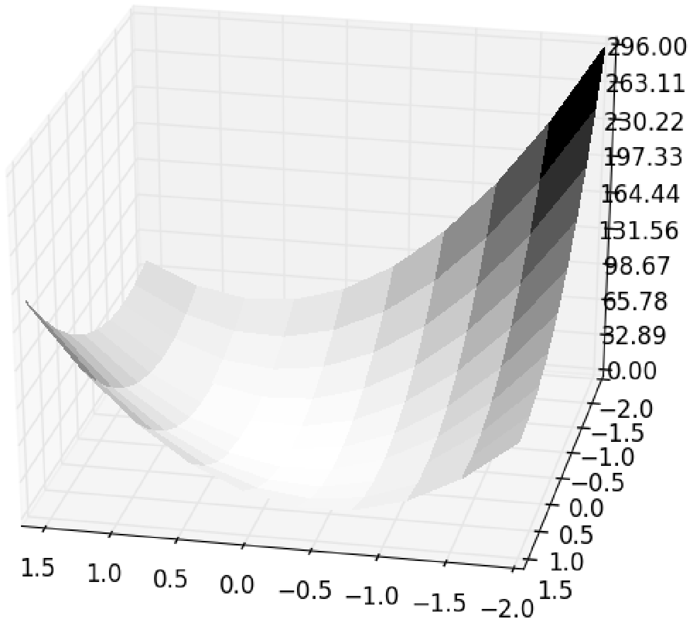
(4) $\lambda_i \leq 0$ jokaiselle i jos ja vain jos $A \leq 0$.
(5) λ_i on reaalinen.

Esimerkki 3.2. Olkoon matriisi $A = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}$, Tämä on positiivisesti definiittinen, sillä sen karakteristinen polynomi on

$$\begin{aligned} \det(A - \lambda I) &= \begin{vmatrix} 5-\lambda & 2 \\ 2 & 3-\lambda \end{vmatrix} \\ &= (5-\lambda)(3-\lambda) - 4 \\ &= \lambda^2 - 8\lambda + 11 \end{aligned}$$

ja sen juuret eli matriisin A ominaisarvot ovat $\lambda = 4 \pm \sqrt{5} > 0$.

Matriisin A neliömuodon $f(x) = x^* A x$ kuvaaja on kuvassa 3.1.



Kuva 3.1. Positiivisesti definiitin matriisin $A = A_{2\times 2}$ neliömuoto

Matriisiyhtälölle $Ax = b$ sopiva neliömuoto on

$$f(x) = \frac{1}{2} x^* A x - b^* x, \tag{3.3}$$

missä $x \in \mathbb{C}^n, x \neq 0$ ja b ovat vektoreita. Tutkitaan milloin neliömuoto f on pienimmillään käyttämällä siihen neliömuodon gradienttia.

MÄÄRITELMÄ 3.3. Olkoon f matriisin neliömuoto. Neliömuodon f *gradientti* on

$$\nabla f(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} f(x) \\ \vdots \\ \frac{\partial}{\partial x_n} f(x) \end{bmatrix}. \tag{3.4}$$

Olkoot vektorit $x = [x_1, \cdots, x_n]$ ja $b = [b_1, \cdots, b_n]$ ja matriisi $A \in M(n, n, \mathbb{C})$. Nyt saadaan neliömuodosta

$$\begin{aligned} f(x) &= \tfrac{1}{2} x^* A x - b^* x \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n} x_i \sum_{j=1}^{n} (x_j a_{i,j}) - \sum_{l=1}^{n} b_l^* x_l \end{aligned}$$

gradientti

$$\begin{aligned} \nabla f(x) &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2x_1 a_{11} + \sum_{i=2}^{n} x_i a_{i1} + \sum_{j=2}^{n} x_j a_{1j} - b_1 \\ 2x_2 a_{22} + \sum_{i=1, i\neq 2}^{n} x_i a_{i2} + \sum_{j=1, j\neq 2}^{n} x_j a_{2j} - b_2 \\ \vdots \\ 2x_k a_{kk} + \sum_{i=1, i\neq k}^{n} x_i a_{ik} + \sum_{j=1, j\neq k}^{n} x_j a_{kj} - b_k \\ \vdots \\ 2x_n a_{nn} + \sum_{i=1}^{n-1} x_i a_{in} + \sum_{j=1}^{n-1} x_j a_{nj} - b_n \end{bmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i a_{i1} \\ \sum_{i=1}^{n} x_i a_{i2} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_i a_{in} \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i a_{1i} \\ \sum_{i=1}^{n} x_i a_{2i} \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^{n} x_i a_{ni} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \\ &= \tfrac{1}{2} A x + \tfrac{1}{2} A^* x - b. \end{aligned}$$

Huomataan, että jos matriisi A on itseadjungoitu niin gradientti tulee muotoon

$$\nabla f(x) = Ax - b$$

ja jos A on positiivisesti definiittinen, niin neliömuoton (3.3) globaali minimi saadaan, kun $\nabla f(x) = Ax - b = 0$.

3.2. Jyrkimmän laskun menetelmä

Jyrkimmän laskun menetelmässä minimoidaan neliömuodon gradienttia. Oletetaan tunnetuksi (ks. [**6**, s. 714]), että gradientti vähenee voimakkaimmin negatiivisen gradientin suuntaan. Tällöin pisteen x_c ympäristössä neliömuodon gradientin väheneminen voimakkaimmin on negatiivisen gradientin $-\nabla f(x_c) = b - Ax_c$ suuntaan. Käytetään erotukselle

$$r_c = b - Ax_c$$

nimitystä pisteen x_c *residuaali*. Jyrkimmän laskun menetelmässä seuraava iteraatiopiste löytyy negatiivisen gradientin suuntaisen janan ja neliömuotoisen matriisin kuvaajan leikkauspisteestä x_{c+1}. Selkeyden vuoksi merkitään iteraatiokierroksen lähtöpistettä indeksillä 0 ja loppupistettä indeksillä 1. Nyt siis loppupiste $x_1 = x_0 + \alpha x_0$ jollekin α. Tiedetään, että pistessä x_1 residuaali r_1 antaa seuraavan vähenemispisteen suunnan.

Pisteen x_1 selvittämistä varten tarvitsee vielä selvittää kerroin α. Valitaan α siten, että residuaalien r_0 ja r_1 pistetulo on 0, jolloin

$$\begin{aligned}
0 &= r_1^* r_0 \\
0 &= (b - Ax_1)^* r_0 \\
0 &= (b - A(x_0 + \alpha x_1))^* r_0 \\
0 &= (b - Ax_0)^* r_0 - \alpha (Ar_0)^* r_0 \\
r_0^* r_0 &= \alpha r_0^* A r_0 \\
\alpha &= \frac{r_0^* r_0}{r_0^* A r_0},
\end{aligned}$$

jos $r_0 \neq 0$. Tällöin on olemassa $\alpha \in \mathbb{R}$ siten, että $f(x_c + \alpha r_c) < f(x_c)$. Yleisesti asettamalla arvoksi $\alpha = r_c^* r_c / r_c^* A r_c$ saadaan

$$\begin{aligned}
f(x_c + \alpha r_c) &= \tfrac{1}{2}(x_c + \alpha r_c)^* A (x_c + \alpha r_c) - (x_c + \alpha r_c)^* b \\
&= \tfrac{1}{2}(x_c^* A x_c + \alpha r_c^* A x_c + \alpha^2 r_c^* A r_c + \alpha x_c^* A r_c) - x_c^* b - \alpha r_c^* b \\
&= f(x_c) + \frac{1}{2}\alpha^2 r_c^* A r_c - \alpha r_c^* r_c \\
&= f(x_c) - \frac{1}{2}\alpha r_c^* r_c \\
f(x_c + \alpha r_c) &= f(x_c) - \frac{1}{2}\frac{(r_c^* r_c)^2}{r_c^* A r_c}.
\end{aligned}$$

Pitää vielä osoittaa, että jono $f(x_c)$ suppenee eli $|f(x_c + \alpha r_c)| \leq |f(x_c)|$. Matriisi A on itseadjungoituna myös normaali, sillä se täyttää normaalin matriisin ehdon $A^* A = AA^*$. Tällöin on olemassa unitaarinen matriisi U siten, että $A = U^* D U$, missä D on diagonaalimatriisi, joka on similaari matriisin A kanssa. Merkitään vektoria $z = Ur_c$. Nyt

$$r_c^* A r_c = r_c^* U^* D U r_c = z_c^* D z,$$

jolloin sen jokaiselle komponentille on

$$z_i^* d_i z_i = z_i^* z_i d_i = |z_i|^2 d_i.$$

Matriisin D diagonaalin alkiot koostuvat sen ominaisarvoista λ_i, jotka ovat similaarisuuden perusteella samat kuin matriisin A ominaisarvot ja siten myös $\lambda_i > 0$. Siis

$$\frac{1}{2}\frac{(r_c^* r_c)^2}{r_c^* A r_c} > 0$$

ja

$$f(x_c) - \frac{1}{2}\frac{(r_c^* r_c)^2}{r_c^* A r_c} < f(x_c).$$

Tällöin jono $f(x_c)$ on suppeneva ja kun residuaali r_k on tarpeeksi lähellä nollaa niin saadaan ratkaisuksi x_k. Nyt saadaan algoritmiksi:

ALGORITMI 3.4 (Konjugaattigradienttimenetelmän esiversio). *Olkoon x_0 alkuvektori, k iteraatioindeksi ja r residuaali. Konjugaattimenetelmän esiversio yhtälön $Ax = b$ ratkaisemiseksi on nyt*

$k = 0$
$r = b - Ax_0$
$\rho_0 = \|r\|_2^2$
toista, kunnes $r = 0$ ***:***
  $k = k + 1$
  $\alpha_k = r_{k-1}^* r_{k-1} / r_{k-1}^* A r_{k-1}$
  $x_k = x_{k-1} + \alpha_k r_{k-1}$
  $r_k = b - Ax$
$x = x_k.$

Menetelmänä tämä on heikohko, sillä kyseistä menetelmää käyttäen oskilloidaan ratkaisun ympärillä puolelta toiselle sen sijaan että lähestytään ratkaisua sulavasti.

3.3. A-konjugaatit etsintäsuunnat

Konjugaattigradienttimenetelmää varten täytyy parantaa jyrkimmän laskun menetelmää tutkimalla yleistä suuntavektoria p_k. Kuten aikaisemmin, osoitetaan, että yleisen suuntavektorin p_k avulla päästään lähemmäksi ratkaisua, eli

$$f(x_{k-1} + \alpha p_k) < f(x_{k-1})$$

asettamalla $\alpha = \alpha_k = p_k^* r_{k-1} / p_k^* A p_k$:

$$\begin{aligned} f(x_{k-1} + \alpha p_k) &= \frac{1}{2}(x_{k-1} + \alpha p_k)^* A (x_{k-1} + \alpha p_k) - (x_{k-1} + \alpha p_k)^* b \\ &\vdots \\ f(x_{k-1} + \alpha p_k) &= f(x_{k-1}) - \frac{1}{2}\frac{(p_k^* r_{k-1})^2}{p_k^* A p_k}, \end{aligned}$$

kun $p_k^* r_{k-1} \neq 0$ eli kun p_k^* ja r_{k-1} eivät ole keskenään ortogonaaliset. Näin on siis millä tahansa edellä mainitun ehdon täyttävällä suuntavektorilla eli etsintäsuunnalla p_k.

Jos etsintäsuunnat span$\{p_1, p_2, ..., p_k\}$ ovat lineaarisesti riippumattomia ja x_k antaa minimin

$$\min_{x \in x_0 + \text{span}\,\{p_1, p_2, ..., p_k\}} f(x), \tag{3.5}$$

missä $k = 1, 2, ...$, niin iteraatiolla n saadaan ratkaisu x_n yhtälölle $Ax_n = b$.

MÄÄRITELMÄ 3.5. Olkoot vektorit $\{p_1, p_2, ..., p_k\}$ lineaarisesti riippumattomia. Niitä sanotaan A-konjugaateiksi, jos pätee $p_i^* A p_j = 0$ kaikille $i \neq j$.

Seuraavaksi määritetään etsintäsuunta p_n. Olkoot $P_{k-1} = [p_1, ..., p_{k-1}]$, $y \in \mathbb{R}^{k-1}$ ja $\alpha \in \mathbb{R}$ siten, että

$$\begin{aligned}
x_k &= x_0 + P_{k-1}y + \alpha p_k, \text{ jolloin} \\
f(x_k) &= f(x_0 + P_{k-1}y + \alpha p_k) \\
&\vdots \\
&= f(x_0 + P_{k-1}y) + \alpha y^* P_{k-1}^* A p_k + \frac{\alpha^2}{2} p_k^* A p_k - \alpha p_k^* r_0.
\end{aligned}$$

Jos p_k kuuluu vektoreiden $\{Ap_1, Ap_2, ..., Ap_{k-1}\}$ virittämään aliavaruuden ortogonaalikomplementtiin eli $p_k \in (\operatorname{span}\{Ap_1, Ap_2, ..., Ap_{k-1}\})^\perp$, niin $\alpha y^* P_{k-1}^* A p_k = 0$. Tällöin päästään tilanteeseen, jossa minimoidaan lauseketta (3.5) vektorin y ja skalaarin α yli. Tällöin (3.5) tulee muotoon

$$\begin{aligned}
\min_{x \in x_0 + \operatorname{span}\{p_1, p_2, ..., p_k\}} f(x) &= \min_{y,\alpha} f(x_0 + P_{k-1}y + \alpha p_k) \\
&= \min_{y,\alpha} (f(x_0 + P_{k-1}y) + \alpha y^* P_{k-1}^* A p_k + \frac{\alpha^2}{2} p_k^* A p_k - \alpha p_k^* r_0) \\
&= \min_y f(x_0 + P_{k-1}y) + \min_\alpha (\frac{\alpha^2}{2} p_k^* A p_k - \alpha p_k^* r_0).
\end{aligned}$$

Jos $y_{k-1} = \min_y f(x_0 + P_{k-1}y)$, niin $\min_\alpha (\frac{\alpha^2}{2} p_k^* A p_k - \alpha p_k^* r_0) = \alpha_k = \frac{p_k^* r_0}{p_k^* A p_k}$ sillä se antaa ratkaisun yhtälölle

$$\frac{\alpha^2}{2} p_k^* A p_k - \alpha p_k^* r_0 = \frac{(p_k^* r_0)^2}{2 p_k^* A p_k} - \frac{(p_k^* r_0)^2}{p_k^* A p_k}.$$

A-konjugaattisuuden nojalla

$$\begin{aligned}
p_k^* r_{k-1} &= p_k^*(b - Ax_{k-1}) \\
&= p_k^*(b - A(x_0 + P_{k-1}y_{k-1})) \\
&= p_k^* r_0.
\end{aligned}$$

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

Tämä ei kuitenkaan anna kovinkaan tarkkaa määrittelyä sille, miten vektori p_k saadaan määritettyä tai edes sitä onko se olemassa.

Lemma 3.6. *Jos on olemassa residuaali $r_{k-1} \neq 0$, niin on olemassa jokin etsintäsuunta $p_k \in \operatorname{span}\{Ap_1, Ap_2, ..., Ap_{k-1}\}^\perp$ siten, että $p_k^* r_{k-1} = 0$.*

Todistus. Jos $k = 1$, niin asetetaan $p_1 = r_0$. Olkoon $r_{k-1} \neq 0$. Jos $k > 1$, niin

$$\begin{aligned}
&A^{-1}b \notin x_0 + \operatorname{span}\{p_1, ..., p_{k-1}\} \\
\Rightarrow &b \notin Ax_0 + \operatorname{span}\{Ap_1, ..., Ap_{k-1}\} \\
\Rightarrow &r_0 \notin \operatorname{span}\{Ap_1, ..., Ap_{k-1}\}.
\end{aligned}$$

Nyt on siis olemassa $p \in \operatorname{span}\{Ap_1, ..., Ap_{k-1}\}^{\perp}$ siten, että $p^* r_0 \neq 0$. Koska $x_{k_1} \in x_0 + \operatorname{span}\{p_1, ..., p_{k-1}\}$, niin $r_{k-1} \in r_0 + \operatorname{span}\{Ap_1, ..., Ap_{k-1}\}$.

Tällöin $p^* r_{k-1} = p^* r_0 \neq 0$. □

On siis todistettu, että vektorisuunta p_k todellakin on olemassa. Valitaan vektori p_k siten, että se on mahdollisimman lähellä residuaalia r_{k-1}, jolloin

$$p_k = \min(\|p - r_{k-1}\|_2)$$

kaikille vektoreille $p \in \operatorname{span}\{Ap_1, ..., Ap_{k-1}\}^{\perp}$.

LEMMA 3.7. *Jos $k \geq 2$, niin vektorille p_k on*

$$p_k = r_{k-1} - AP_{k-1} z_{k-1},$$

missä $P_{k-1} = [p_1, \cdots, p_k]$ ja z_{k-1} antavat ratkaisun pienimmän neliösumman ongelmalle $\min_{z \in \mathbb{R}^{k-1}} \|r_{k-1} - AP_{k-1} z\|_2$.

TODISTUS. Olkoon p oletuksissa mainitun pienimmän neliösumman ongelman ratkaisu, jolloin

$$p = r_{k-1} - AP_{k-1} z_{k-1}.$$

Tästä ja siitä tiedosta, että p kuuluu vektorijoukon $\{Ap_1, ..., Ap_k\}$ lineaarikombinaatioiden ortogonaalikomplementtiin seuraa se, että vektorin p ja vektorin AP_{k-1} sisätulo on nolla eli $p^* AP_{k-1} = 0$. Lisäksi pseudoinverssin ominaisuuksien perusteella $p = [I - (AP_{k-1})(AP_{k-1})^+] r_{k-1}$ antaa vektorin r_{k-1} ortogonaaliprojektion sarakeavaruuteen $\operatorname{ran}(AP_{k-1}^{\perp})$, jolloin se on lähin sarakeavaruuden $\operatorname{ran}(AP_{k-1}^{\perp})$ vektori vektorille r_{k-1}. Siis $p = p_k$ □

3.4. Konjugaattigradienttimenetelmä

MÄÄRITELMÄ 3.8. Olkoot vektori $v \in \mathbb{C}^n$ ja matriisi $A \in \mathbb{M}_n(\mathbb{C})$. Muotoa

$$\kappa_k(v, A) = \operatorname{span}\{v, Av, A^2 v, ..., A^{k-1} v\}^{\perp}$$

olevia aliavaruuksia sanotaan *Krylovin aliavaruuksiksi.*

LAUSE 3.9. *Konjugaattigradienttimenetelmälle on $k \geq 2$ iteraation jälkeen*

$$r_k = r_{k-1} - \alpha_k A p_k. \tag{3.6}$$

$$P_k^* r_k = 0, \tag{3.7}$$

$$\operatorname{span}\{p_1, \cdots, p_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \cdots, r_{k-1}\} = \kappa_k(v, A), \tag{3.8}$$

$$p_k \in \operatorname{span}\{p_{k-1}, r_{k-1}\}, \tag{3.9}$$

joissa residuaalit $r_0, \cdots, r_{k-1}$ ovat keskenään ortogonaalisia.

TODISTUS. (3.6): Algoritmista 3.4 saadaan vektori

$$x_k = x_{k-1} + \alpha_k r_{k-1}$$
$$Ax_k = Ax_{k-1} + A\alpha_k r_{k-1}.$$

Sovelletaan tähän residuaalin määritelmää

$$\begin{aligned} r_k &= b - Ax_k \\ Ax_k &= b - r_k, \end{aligned}$$

niin saadaan

$$\begin{aligned} b - r_k &= b - r_{k-1} + A\alpha_k r_{k-1} \\ r_k &= r_{k-1} - \alpha_k A r_{k-1}. \end{aligned}$$

(3.7): Koska $x_k = x_0 + P_k y_k$ missä y_k antaa minimin lausekkeelle $f(x_0 + P_k y)$. Koska

$$f(x_0 + P_k y) = f(x_0) + \frac{1}{2}(P_k^* A P_k)y - y^* P_k(b - Ax_0),$$

niin y_k on ratkaisu lineaariselle yhtälölle $(P_k^* A P_k)y = P_k^*(b - Ax_0)$, jolloin

$$0 = P_k^*(b - Ax_0) - (P_k^* A P_k)y = P_k^*(b - A(x_0 + P_k y_k)) = P_k^* r_k.$$

(3.8): Kohdasta (3.6) huomataan, että jokainen vektori r_k on lineaarikombinaatio vektoreista r_{k-1} ja Ap_k, jolloin vektorijoukko $\{Ap_1, \cdots, Ap_{k-1}\}$ on aliavaruuden $\operatorname{span}\{r_0, \cdots, r_{k-1}\}$ aliavaruus eli

$$\{Ap_1, \cdots, Ap_{k-1}\} \subseteq \operatorname{span}\{r_0, \cdots, r_{k-1}\}.$$

Lemmasta 3.7 saadaan

$$p_k = r_{k-1}[Ap_1, \cdots, Ap_{k-1}]z_{k-1} \in \operatorname{span}\{r_0, \cdots, r_{k-1}\},$$

jolloin

$$[p_1, \cdots, p_k] = [r_0, \cdots, r_{k-1}]T,$$

missä T on yläkolmiomatriisi ja epäsingulaarinen, sillä etsintäsuunnat ovat lineaarisesti riippumattomia. Tällöin etsintäsuuntien ja residuaalien lineaarikombinaatiot ovat samat eli

$$\operatorname{span}\{p_1, \cdots, p_k\} = \operatorname{span}\{r_0, \cdots, r_{k-1}\}.$$

Yhteys Krylovin aliavaruuksiin on nähtävissä siitä, että kohdan (3.6) mukaan residuaalit koostuvat aina edellisistä residuaaleista ja koska uusin residuaali on aina ortogonaalinen edellisiin nähden, sillä se kuuluu aliavaruuteen, jonka jäseninä on edellinen residuaali r_{k-1} ja Ap_k. Tällöin se kuuluu myös aliavaruuteen, jonka virittäviä vektoreita ovat $\{r_0, \cdots, r_{k-1}\}$. Siis

$$\begin{aligned} r_k \in \operatorname{span}\{r_{k-1}, Ap_k\} &\subseteq \operatorname{span}\{r_{k-1}, Ar_0, \cdots, Ar_{k-1}\} \\ &= \operatorname{span}\{r_0, Ar_0, A^2 r_0, \cdots, A^{k-1} r_0\} \\ &= \kappa_k(v, A). \end{aligned}$$

(3.9): Jos $k = 2$, niin etsintäsuunta $p_2 \in \operatorname{span}\{r_0, r_1\} = \operatorname{span}\{p_1, r_1\}$ koska $p_1 = r_0$, jolloin p_2 on lineaarikombinaatio etsintäsuunnasta p_1 ja residuaalista r_1.

Jos $k > 2$, niin tutkitaan lemman 3.7 vektoria z_{k-1} lohkoina siten, että

$$z_{k-1} = \begin{bmatrix} w \\ \mu \end{bmatrix},$$

missä w koostuu vektorin z_{k-1} $k-2$ ensimmäisestä komponentista ja μ on vektorin z_{k-1} viimeinen alkio. Koska

$$\begin{aligned} r_{k-1} &= r_{k-2} - \alpha_{k-1} A p_{k-1}, \text{ niin} \\ p_k &= r_{k-1} - A p_{k-1} z_{k-1} \\ &= r_{k-1} - A p_{k-2} w - \mu A p_{k-1} \\ &= (1 + \frac{\mu}{\alpha_{k-1}}) r_{k-1} + s_{k-1}, \end{aligned}$$

missä vektori

$$s_{k-1} = -\frac{\mu}{\alpha_{k-1}} r_{k-2} - A P_{k-2} w$$

ja vektori s_{k-1} kuuluu vektoreiden r_{k-2} ja $AP_{k-2}w$ virittämään aliavaruuteen, joka taas on vektoreiden $r_{k-2}, Ap_1, \cdots, Ap_{k-2}$ virittämän aliavaruuden aliavaruus, joka taas vastaavasti on residuaalien $r_0, \cdots, r_{k-2}$ virittämän aliavaruuden aliavaruus. Edellä mainittujen residuaalien keskenäisen ortogonaalisuuden nojalla vektori s_{k-1} on ortogonaalinen vektoriin r_{k-1} nähden, jolloin minimoitavaksi tulee vektorin p_k normin neliö, joka on lemman 3.7 nojalla

$$\|p_k\|_2^2 = (1 + \frac{\mu}{\alpha_{k-1}})^2 \|r_{k-1}\|_2^2 + \|s_{k-1}\|_2^2 .$$

Koska vektori z_{k-2} on lausekkeen $\|r_{k-2} - AP_{k-2} z\|_2$ minimi ja p_{k-1} on riippuvainen vektorista z_{k-2}, niin vektori s_{k-1} on vektorin p_{k-1} monikerta ja sen seurauksena p_k on residuaalin r_{k-1} ja vektorin p_{k-1} lineaarikombinaatio, jolloin

$$p_k \in \operatorname{span}\{r_{k-1}, p_{k-1}\}.$$

□

Nyt siis $p_k = r_{k-1} + \beta_k p_{k-1}$ jollekin skalaarille β_k, joten

$$\begin{aligned} p_k &= r_{k-1} + \beta_k p_{k-1} \\ p_{k-1}^* A p_k &= p_{k-1}^* A r_{k-1} + p_{k-1}^* A \beta_k p_{k-1}. \end{aligned}$$

Koska $p_{k-1}^* A p_k = 0$, niin saadaan

$$\beta = -\frac{p_{k-1}^* A r_{k-1}}{p_{k-1}^* A p_{k-1}}.$$

Nyt konjugaattigradienttimenetelmä saadaan seuraavaan muotoon

ALGORITMI 3.10 (Konjugaattigradienttimenetelmä). *Olkoon matriisi $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ itseadjungoitu ja positiivisesti definiittinen, vektori $b \in \mathbb{R}$ ja x_0 alkuvektori. Tällöin seuraava algoritmi antaa ratkaisun $x \in \mathbb{R}$ yhtälölle $Ax = b$.*

$k = 0$
$r = b - Ax_0$
toista, kunnes $r_k = 0$ ***:***
  $k = k + 1$
  jos $k = 1$ ***, niin***
    $p = r$
  muuten
    $\beta_k = -p_{k-1}^* A r_{k-1} / p_{k-1}^* A p_{k-1}$
    $p_k = r_{k-1} + \beta_k p_{k-1}$
  $\alpha_k = p_k^* r_{k-1} / p_k^* A p_k$
  $x_k = x_{k-1} + \alpha_k p_k$
  $r_k = b - Ax_k$
$x = x_k$ *on ratkaisu.*

Säädetään vielä algoritmia laskennallisesti kevyemmäksi käyttämällä edellisen todistuksen tietoa residuaalin rekursiivisuudesta, eli $r_k = r_{k-1} - \alpha A p_k$ ja otetaan huomioon se, että iteratiivinen menetelmä ei kuitenkaan aina päädy eksaktiin ratkaisuun vaan se saattaa lähestyä ratkaisua äärettömästi, jolloin ratkaisua voidaan approksimoida residuaalin euklidisen normin $\|r\|$ avulla asettamalla $\rho = r^* r = \|r\|_2^2$ ja ottamalla ehdoksi $\sqrt{\rho} < \epsilon \|b\|_2$. Toisaalta laskennallisesti ajateltuna voidaan rajoittaa iteraatioiden määrää jollain vakiolla k_{max}, jolloin toiseksi ehdoksi tulee $k < k_{max}$. Nyt konjugaattigradienttimenetelmä saadaan muotoon:

Algoritmi 3.11 (Konjugaattigradienttimenetelmä). *Olkoon matriisi $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ itseadjungoitu ja positiivisesti definiittinen, vektori $b \in \mathbb{R}$ ja x_0 alkuvektori. Tällöin seuraava algoritmi antaa ratkaisun approksimaation $x \in \mathbb{R}$ yhtälölle $Ax = b$.*

$k = 0$
$r = b - Ax_0$
$\rho_0 = \|r\|_2^2$
toista, kunnes $\sqrt{\rho} < \epsilon \|b\|_2$ ***tai*** $k \geq k_{max}$ ***:***
  $k = k + 1$
  jos $k = 1$ ***, niin***
    $p = r$
  muuten
    $\beta_k = \rho_{k-1} / \rho_{k-2}$
    $p = r + \beta_k p$
  $\alpha_k = \rho_{k-1} / p^* A p$
  $x_k = x_{k-1} + \alpha_k p$
  $r_k = r_{k-1} - \alpha_k A p$
  $\rho_k = \|r\|_2^2$
$x = x_k.$

Esimerkki 3.12. Tutkitaan esimerkin 1.3 matriisyhtälöryhmää

$$\begin{cases} 5x_1 - 2x_2 + 3x_3 & = -1 \\ -3x_1 + 9x_2 + x_3 & = 2 \\ 2x_1 - x_2 - 7x_3 & = 3 \end{cases}$$

vastaavaa matriisiyhtälöä

$$Ax = b$$
$$\begin{bmatrix} 5 & -2 & 3 \\ -2 & 9 & -1 \\ 3 & -1 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Koska matriisin A likiarvoiset ominaisarvot ovat 11.1268, 7.2228 ja 2.6503, niin A on positiivisesti definiitti. Lisäksi matriisi A on itseadjungoitu, joten voidaan käyttää konjugaattigradienttimenetelmää yhtälön ratkaisemiseksi.

Ratkaistaan yhtälö käyttämällä alkuarvausta $x^0 = \begin{bmatrix} x_1^0 \\ x_2^0 \\ x_3^0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$ ja asettamalla $\epsilon \|b\|_2 = 0.001$. Ensimmäisellä iteraatiokierroksella menetelmää käyttämällä saadaan

$$\begin{aligned}
&r = b - Ax_0 = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \\
&\rho_0 = \|r\|_2^2 = \sqrt{|-1|^2 + |2|^2 + |3|^2} = 14 \\
&k = 1 \\
&p = r = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \\
&\alpha_1 = \rho_0 / p^* A p = 14 / \begin{bmatrix} -1 & 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & -2 & 3 \\ -2 & 9 & -1 \\ 3 & -1 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} = 14/82 \approx 0.1707 \\
&x_1 = x_0 + \alpha_1 p = \frac{14}{82} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -0.1707 \\ 0.3415 \\ 0.5122 \end{bmatrix} \\
&r_1 = r_0 - \alpha_1 A p = \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} - \frac{14}{82} \begin{bmatrix} 5 & -2 & 3 \\ -2 & 9 & -1 \\ 3 & -1 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -1 \\ -0.9024 \\ 0.2683 \end{bmatrix} \\
&\rho_1 = \|r\|_2^2 \approx 1.8864.
\end{aligned}$$

Koska $1.8864 > 0.001$, niin menetelmässä siirrytään toiseen iteraatioon

$$
\begin{aligned}
&k = k + 1 = 2\\
&\beta_2 = \rho_1/\rho_0 \approx 1.8864/14 \approx 0.1347\\
&p = r + \beta_2 p = \begin{bmatrix} -1 \\ -0.9024 \\ 0.2683 \end{bmatrix} + 0.1347 \begin{bmatrix} -1 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -1.1347 \\ -0.6330 \\ 0.6725 \end{bmatrix}\\
&\alpha_2 = \rho_1/p^* Ap = 1.8864/ \begin{bmatrix} -1.1347 & -0.6330 & 0.6725 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 5 & -2 & 3 \\ -2 & 9 & -1 \\ 3 & -1 & 7 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -1.1347 \\ -0.6330 \\ 0.6725 \end{bmatrix}\\
&\quad \approx 0.2854\\
&x_2 = x_1 + \alpha_2 p = \begin{bmatrix} -0.1707 \\ 0.3415 \\ 0.5122 \end{bmatrix} + 0.2854 \begin{bmatrix} -1.1347 \\ -0.6330 \\ 0.6725 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -0.4946 \\ 0.1608 \\ 0.7041 \end{bmatrix}\\
&r_2 = r_1 - \alpha_2 Ap = \begin{bmatrix} -1 \\ -0.9024 \\ 0.2683 \end{bmatrix} - 0.2854 \begin{bmatrix} -1.1347 \\ -0.6330 \\ 0.6725 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} -0.3178 \\ 0.2676 \\ -0.2884 \end{bmatrix}\\
&\rho_2 = \|r\|_2^2 \approx 0.2535.
\end{aligned}
$$

Koska $0.2535 > 0.001$, niin menetelmässä siirrytään kolmanteen iteraatioon. Kolmannen iteraation jälkeen $\rho < 0.0001$ ja ratkaisuapproksimaatioksi saadaan

$$x_3 = \begin{bmatrix} -0.5399 \\ 0.1784 \\ -0.6854 \end{bmatrix}.$$

Esimerkki 3.13. Tarkastellaan esimerkin 2.6 tapausta eli kompleksikertoimista matriisiyhtälöä

$$\begin{bmatrix} 3 & 1+i \\ 1-i & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 10 \end{bmatrix}.$$

Alkuarvauksella

$$x^0 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

saadaan konjugaattigradienttimenetelmällä kahden iteraation jälkeen ratkaisuksi

$$x = [-3.0000 + 2.5000i, 7.7500 + 0.2500i].$$

Koska 2×2 neliömatriiseja pystyy kuvaamaan matriisin neliömuodon kuvaajalla, niin vertaillaan Jacobin menetelmää, Gaussin ja Seidelin menetelmää ja konjugaattigradienttimenetelmää myös graafisesti.

Esimerkki 3.14. Olkoon yhtälöryhmää vastaava matriisiyhtälö

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Koska matriisi $\begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 3 \end{bmatrix}$ on positiivisesti definiitti ominaisarvoilla $4 \pm \sqrt{5}$, niin voidaan käyttää konjugaattigradienttimenetelmää

Alkuarvauksella

$$x^0 = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

saadaan Jacobin iterointimenetelmällä yhdeksän iteraation jälkeen ehdolla

$$\left\| x^j - x^{j-1} \right\| < 0.01$$

approksimaatioksi

$$x = [-0.0040, -0.0067],$$

Gaussin ja Seidelin menetelmällä kuuden iteraation jälkeen ehdolla

$$\left\| x^j - x^{j-1} \right\| < 0.01$$

approksimaatioksi

$$x = [-0.0011, -0.0007]$$

ja konjugaattigradienttimenetelmällä kahden iteraation jälkeen ehdolla

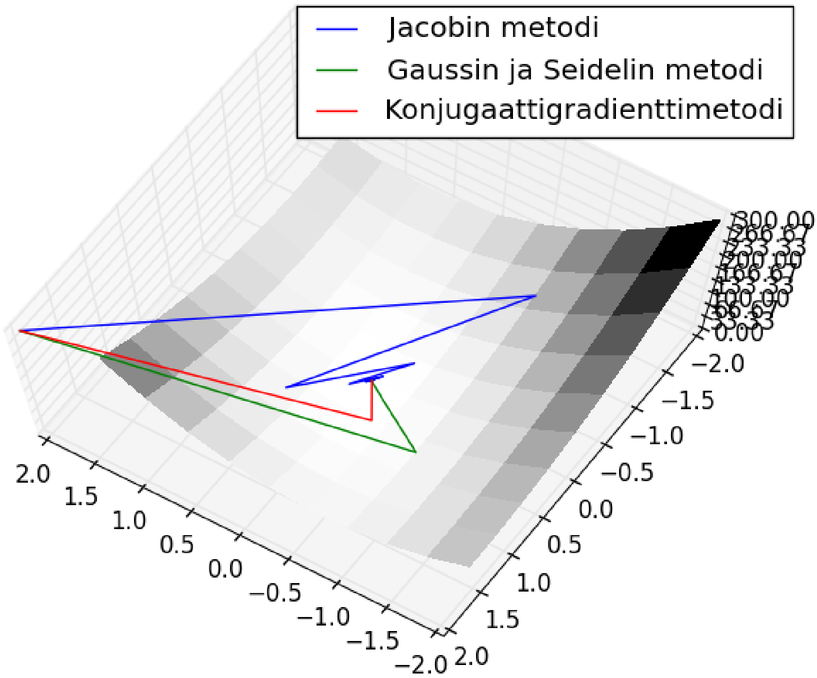
$$\epsilon \left\| b \right\|_2 < 0.01$$

approksimaatioksi

$$x = [-0.0000, -0.0000].$$

Graafinen vertailu matriisin neliömuodon kuvaajalla eri menetelmien lähestymisestä yhtälön ratkaisua kohden matriisin neliömuodon yhtälöä käyttäen on kuvassa 3.2.

Esimerkkejä 2.6, 3.4 ja 3.14 vertailemalla näyttäisi olevan niin, että pienten matriisien tapauksessa konjugaattigradienttimenetelmä on laskennallisesti huomattavasti tehokkaampi kuin Jacobin iteraatiomenetelmä ja Gaussin ja Seidelin iterointimenetelmä.



KUVA 3.2. Eri iteraatiomenetelmien graafinen vertailu

Kirjallisuutta

[1] GENE H. GOLUB ja CHARLES F. VAN LOAN: *Matrix computations.* third edition, The John Hopkins University Press, 1996.

[2] DENIS SERRE: *Matrices: Theory and Applications.* Springer-Verlag New York, Inc.,2002.

[3] MIKKO SAARIMÄKI: *Matriisiteoria.* kurssimoniste, kevät 2013.

[4] MIKKO SAARIMÄKI: *Matriisiseminaari.* kurssimuistiinpanot, kevät 2013.

[5] JONATHAN R. SHEWCHUK: *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain.* School of Computer Science Carnegie Mellon University Pittsburgh, 1994.

[6] ROBERT A. ADAMS: *Calculus: A Complete Course.* seventh edition, Pearson: Adisson Wesley, 2010.