Prirodoslovno-matematički fakultet
Matematički odsjek
Sveučilište u Zagrebu

# ITERATIVNE METODE

## Vježbe 03 - Iterativne metode za linearne sustave

15. rujna 2021.

Sastavili: Nela Bosner, Zvonimir Bujanović

# Sadržaj

# OSNOVNE ITERATIVNE METODE

# Gaussove eliminacije vs iterativne metode

Nedostaci Gaussovih eliminacija:

- Prespore za matrice velikih dimenzija: $\mathcal{O}(n^3)$ za $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.
- Matrice u praksi su rijetko popunjene (*sparse*) i ne čuvaju se kao 2D-polje, već se spremaju samo elementi koji nisu jednaki 0. LU-faktorizacija uništava *strukturu nula* u *sparse* matricama.

# Gaussove eliminacije vs iterativne metode

Nedostaci Gaussovih eliminacija:

- Prespore za matrice velikih dimenzija: $\mathcal{O}(n^3)$ za $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$.
- Matrice u praksi su rijetko popunjene (*sparse*) i ne čuvaju se kao 2D-polje, već se spremaju samo elementi koji nisu jednaki 0. LU-faktorizacija uništava *strukturu nula* u *sparse* matricama.

Zato takve sustave rješavamo iterativno:

**Algoritam (Općenita iterativna metoda)**

$x^{(0)}$ *zadan;*
*k=0;*
**while** ~*uvjet_zaustavljanja*
    *k=k+1;*
    $x^{(k)} = f(x^{(k-1)})$;
**end**
$x \approx x^{(k)}$

# Općenita iterativna metoda

**Algoritam (Općenita iterativna metoda)**

$x^{(0)}$ *zadan;*
*k=0;*
**while** ~*uvjet_zaustavljanja*
    *k=k+1;*
    $x^{(k)} = f(x^{(k-1)})$;
**end**
$x \approx x^{(k)}$

Ciljevi:

- Efikasno računanje $x^{(k)}$ pomoću $x^{(k-1)}$ (jednostavna $f$)
- $x^{(k)} \xrightarrow{k} x$, gdje je $Ax = b$.

# Općenita iterativna metoda

Proučavat ćemo metode oblika

$$x^{(k+1)} = R \cdot x^{(k)} + c, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Ovdje: $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je matrica iteracije, $c \in \mathbb{R}^n$.

# Općenita iterativna metoda

Proučavat ćemo metode oblika

$$x^{(k+1)} = R \cdot x^{(k)} + c, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Ovdje: $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je matrica iteracije, $c \in \mathbb{R}^n$.

Tipičan način konstrukcije metode: $A = M - N$, $M$ regularna.

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ (M - N)x &= b \\ Mx &= Nx + b \\ x &= M^{-1}Nx + M^{-1}b \end{aligned}$$

# Općenita iterativna metoda

Proučavat ćemo metode oblika

$$x^{(k+1)} = R \cdot x^{(k)} + c, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Ovdje: $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ je matrica iteracije, $c \in \mathbb{R}^n$.

Tipičan način konstrukcije metode: $A = M - N$, $M$ regularna.

$$\begin{aligned} Ax &= b \\ (M - N)x &= b \\ Mx &= Nx + b \\ x &= M^{-1}Nx + M^{-1}b \end{aligned}$$

Odavde dobivamo iterativnu metodu:

$$x^{(k+1)} = \underbrace{M^{-1}N}_{R} \cdot x^{(k)} + \underbrace{M^{-1}b}_{c}$$

# Konvergencija općenite iterativne metode

**Teorem**

*Neka je $A = M - N \in \mathbb{R}^{n\times n}$ regularna matrica i $b \in \mathbb{R}^n$. Niz iteracija $x^{(0)}, x^{(1)}, \ldots, x^{(k)}, \ldots$ definiran sa*

$$x^{(k+1)} = M^{-1}N \cdot x^{(k)} + M^{-1}b$$

*konvergira prema $x = A^{-1}b$ za svaku početnu iteraciju $x^{(0)}$ ako i samo ako je*

- *$M$ regularna matrica,*
- *$\rho(M^{-1}N) < 1$ (spektralni radijus),*

*Tvrdnja teorema vrijedi i kada drugi uvjet zamijenimo sa*

- *$\|M^{-1}N\| < 1$ za neku konzistentnu matričnu normu $\|\cdot\|$.*

# Spektralni radijus, konzistentne norme

Spektralni radijus: za $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$ je

$$\rho(A) := \max\{|\lambda| \ : \ \lambda \in \Lambda(A)\}$$

Matrična norma $\|\cdot\|$ je konzistentna ako za sve $A, B \in \mathbb{C}^{n \times n}$ vrijedi:

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|.$$

Na primjer: $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_\infty$, $\|\cdot\|_F$.

# Spektralni radijus, konzistentne norme

Spektralni radijus: za $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je

$$\rho(A) := \max\{|\lambda| \ : \ \lambda \in \Lambda(A)\}$$

Matrična norma $\|\cdot\|$ je konzistentna ako za sve $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ vrijedi:

$$\|AB\| \leq \|A\| \cdot \|B\|.$$

Na primjer: $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_\infty$, $\|\cdot\|_F$.

**Teorem**

*Za svaku konzistentnu normu $\|\cdot\|$ na $\mathbb{C}^{n\times n}$ i svaku matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ vrijedi:*

$$\rho(A) \leq \|A\|.$$

## Spektralni radijus, konzistentne norme

Spektralni radijus: za $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je

$$\rho(A) := \max\{|\lambda| \;:\; \lambda \in \Lambda(A)\}$$

Matrična norma $\|\cdot\|$ je konzistentna ako za sve $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$ vrijedi:

$$\|AB\| \le \|A\| \cdot \|B\|.$$

Na primjer: $\|\cdot\|_2$, $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_\infty$, $\|\cdot\|_F$.

**Teorem**

*Za svaku konzistentnu normu $\|\cdot\|$ na $\mathbb{C}^{n\times n}$ i svaku matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ vrijedi:*

$$\rho(A) \le \|A\|.$$

*Za svaku $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ i svaki $\varepsilon > 0$ postoji konzistentna matrična norma $\|\cdot\|_{A,\varepsilon}$ takva da vrijedi:*

$$\|A\|_{A,\varepsilon} \le \rho(A) + \varepsilon.$$

# Zadatak 1

Neka vrijede pretpostavke Teorema o konvergenciji iterativne metode za $R = M^{-1}N$. Odredite kriterij zaustavljanja, tj. broj iteracija $k$ dovoljan da vrijedi

$$\|x^{(k)} - x\| < \varepsilon,$$

za zadanu točnost $\varepsilon$.

# Zadatak 1

Neka vrijede pretpostavke Teorema o konvergenciji iterativne metode za $R = M^{-1}N$. Odredite kriterij zaustavljanja, tj. broj iteracija $k$ dovoljan da vrijedi

$$\|x^{(k)} - x\| < \varepsilon,$$

za zadanu točnost $\varepsilon$.

Rješenje.

$$\frac{\|R\|^k}{1 - \|R\|} \cdot \|x^{(1)} - x^{(0)}\| < \varepsilon.$$

# Zadatak 2

Dan je sustav $Ax = b$, gdje je

$$A = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0.1 & 0.1 \\ 5 & 5 & 0 & 0 & 0.1 \\ 0.1 & 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0.1 \\ 0.1 & 0.1 & 5 & 0 & 5 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} -9.7 \\ -14.8 \\ -0.2 \\ 5.2 \\ 9.7 \end{bmatrix}$$

Odredite rastav $A = M - N$ i pripadnom iterativnom metodom riješite sustav tako da greška u svakoj nepoznanici bude manja od $10^{-3}$.

# Zadatak 2

Rješenje. Stavimo

$$M = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 5 \end{bmatrix}, \quad N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -0.1 & -0.1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.1 \\ -0.1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.1 \\ -0.1 & -0.1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

# Zadatak 2

Rješenje. Stavimo

$$M = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & 5 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 5 & 0 \\ 0 & 0 & 5 & 0 & 5 \end{bmatrix}, \quad N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -0.1 & -0.1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.1 \\ -0.1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0.1 \\ -0.1 & -0.1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

```
inv(M)
```

```
    0.2000         0         0         0         0
   -0.2000    0.2000         0         0         0
         0         0    0.2000         0         0
         0         0         0    0.2000         0
         0         0   -0.2000         0    0.2000
```

# Zadatak 2

## Rješenje.

```
R = M \ N
```

```
         0         0         0   -0.0200   -0.0200
         0         0         0    0.0200         0
   -0.0200         0         0         0         0
         0         0         0         0   -0.0200
    0.0000   -0.0200         0         0         0
```

Rješenje.

```
R = M \ N
```

```
         0         0         0   -0.0200   -0.0200
         0         0         0    0.0200         0
   -0.0200         0         0         0         0
         0         0         0         0   -0.0200
    0.0000   -0.0200         0         0         0
```

Želimo $\left\|x^{(k)} - x\right\|_\infty < 10^{-3}$. Da li metoda konvergira?

```
norm( R, inf )
```

```
      0.0400
```

Dakle, metoda $x^{(k+1)} = Rx^{(k)} + c$ konvergira jer $\|R\|_\infty < 1$, uz `c = M\b = [-1.94 -1.02 -0.04 1.04 1.98]'`.

# Zadatak 2

Rješenje. Koliko iteracija je potrebno?
Stavimo $x^{(0)} = 0$; tada $x^{(1)} = c$ i $\left\|x^{(1)} - x^{(0)}\right\|_\infty = \|c\|_\infty = 1.98$.

Prethodni zadatak: dovoljno je osigurati

$$\begin{aligned}
\frac{\|R\|_\infty^k}{1 - \|R\|_\infty} \|c\|_\infty &< 10^{-3} \\
\frac{(0.04)^k}{0.96} \cdot 1.98 &< 10^{-3} \\
(0.04)^k &< 4.85 \cdot 10^{-4} \\
k \log(0.04) &< \log(4.85 \cdot 10^{-4}) \\
k &> 2.3709
\end{aligned}$$

Dakle, možemo uzeti $k = 3$.

## Rješenje.

```
x0 = [0; 0; 0; 0; 0];
x1 = R*x0 + c
x2 = R*x1 + c
x3 = R*x2 + c
```

```
x1 =            x2 =            x3 =
  -1.9400000      -2.0004000      -2.0000160
  -1.0200000      -0.9992000      -0.9999920
  -0.0400000      -0.0012000       0.0000080
   1.0400000       1.0004000       0.9999920
   1.9800000       2.0004000       1.9999840
```

# Zadatak 2

## Rješenje.

```
x0 = [0; 0; 0; 0; 0];
x1 = R*x0 + c
x2 = R*x1 + c
x3 = R*x2 + c
```

```
x1 =                x2 =                x3 =
  -1.9400000          -2.0004000          -2.0000160
  -1.0200000          -0.9992000          -0.9999920
  -0.0400000          -0.0012000           0.0000080
   1.0400000           1.0004000           0.9999920
   1.9800000           2.0004000           1.9999840
```

Egzaktno rješenje je `x=[-2 -1 0 1 2]'`.
Zaista, $\left\|x - x^{(3)}\right\| < 10^{-3}$.

# Jacobijeva metoda

Rastavimo $A = D + L + U$.
$D$=dijagonala, $L$=donji trokut, $U$=gornji trokut od $A$.

Jacobi: $M_J = D$, $N_J = -L - U$, odnosno,

$$x^{(k+1)} = \underbrace{-D^{-1}(L+U)}_{R_J} \cdot x^{(k)} + \underbrace{D^{-1}b}_{c_J}.$$

Rastavimo $A = D + L + U$.
$D$=dijagonala, $L$=donji trokut, $U$=gornji trokut od $A$.

Jacobi: $M_J = D$, $N_J = -L - U$, odnosno,

$$x^{(k+1)} = \underbrace{-D^{-1}(L+U)}_{R_J} \cdot x^{(k)} + \underbrace{D^{-1}b}_{c_J}.$$

**Teorem**

*Ako je matrica sustava $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ strogo dijagonalno dominantna, tj. ako je*

$$\sum_{\substack{j=1\\ j\neq i}}^{n} |A_{ij}| < |A_{ii}|, \quad i = 1, 2, \ldots, n,$$

*onda Jacobijeva metoda konvergira za svaku početnu iteraciju. (Tada je $\|R_J\|_\infty < 1$.)*

# Jacobijeva metoda

**Algoritam (Jacobi)**

$x^{(0)}$ *zadan.*
**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$
  **for** $i = 1, 2, \ldots, n$
    $x_i^{(k+1)} = \frac{1}{A_{ii}} \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(k)} - \sum_{j=i+1}^{n} A_{ij} x_j^{(k)} \right)$
  **end**
**end**

Iz $i$-te jednadžbe izrazimo $x_i$ pomoću ostalih varijabli.
Za aproksimaciju $x_i^{(k+1)}$ koristimo vrijednosti preostalih $x$-eva iz $k$-tog koraka.

U implementaciji se koriste dva vektora za $x^{(k)}$.

# Gauss-Seidelova metoda

Rastavimo $A = D + L + U$.
$D$=dijagonala, $L$=donji trokut, $U$=gornji trokut od $A$.

Gauss-Seidel: $M_{GS} = D + L$, $N_{GS} = -U$, odnosno,

$$x^{(k+1)} = \underbrace{-(D+L)^{-1}U}_{R_{GS}} \cdot x^{(k)} + \underbrace{(D+L)^{-1}b}_{c_{GS}}.$$

# Gauss-Seidelova metoda

Rastavimo $A = D + L + U$.
$D$=dijagonala, $L$=donji trokut, $U$=gornji trokut od $A$.

Gauss-Seidel: $M_{GS} = D + L$, $N_{GS} = -U$, odnosno,

$$x^{(k+1)} = \underbrace{-(D+L)^{-1}U}_{R_{GS}} \cdot x^{(k)} + \underbrace{(D+L)^{-1}b}_{c_{GS}}.$$

**Teorem**

*Ako je matrica sustava $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ simetrična i pozitivno definitna, onda Gauss-Seidelova metoda konvergira za svaku početnu iteraciju.*

*Ako je matrica sustava $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ strogo dijagonalno dominantna, onda Gauss-Seidelova metoda konvergira za svaku početnu iteraciju.*

# Gauss-Seidelova metoda

## Algoritam (Gauss-Seidel)

$x^{(0)}$ *zadan.*
**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$
  **for** $i = 1, 2, \ldots, n$
    $x_i^{(k+1)} = \frac{1}{A_{ii}} \left( b_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} A_{ij} x_j^{(k)} \right)$
  **end**
**end**

Iz $i$-te jednadžbe izrazimo $x_i$ pomoću ostalih varijabli.
Za aproksimaciju $x_i^{(k+1)}$ koristimo vrijednosti preostalih $x$-eva:

- iz $k+1$-vog koraka ako smo ih već ranije izračunali: $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \ldots, x_{i-1}^{(k+1)}$;
- iz $k$-tog koraka ako ih još nismo izračunali: $x_{i+1}^{(k)}, x_{i+2}^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}$.

U implementaciji se koristi samo jedan vektor za $x^{(k)}$.

# Zadatak 3

Napišite funkcije

```
xk = Jacobi(A,b,x0,kMax)
xk = GaussSeidel(A,b,x0,kMax)
```

koje vraćaju aproksimaciju rješenja sustava $Ax = b$ nakon `kMax` koraka Jacobijeve, odnosno Gauss-Seidelove metode s početnom iteracijom `x0`.

Pomoću ovih metoda riješite sustav $Ax = b$ uz

$$A = \begin{bmatrix} 10 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 10 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 10 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 10 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} -8 \\ 0 \\ 12 \\ 20 \end{bmatrix}$$

tako da greška u svakoj koordinati ne prelazi $10^{-3}$.

# Zadatak 3

Rješenje. Jacobi:

$$R_J = -D^{-1}(L+U) = -\frac{1}{10}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad c_J = D^{-1}b = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0 \\ 1.2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

# Zadatak 3

Rješenje. Jacobi:

$$R_J = -D^{-1}(L+U) = -\frac{1}{10}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad c_J = D^{-1}b = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0 \\ 1.2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Metoda konvergira jer je $\rho(R_J) \leq \|R_J\|_\infty = 0.2 < 1$.

# Zadatak 3

Rješenje. Jacobi:

$$R_J = -D^{-1}(L+U) = -\frac{1}{10}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad c_J = D^{-1}b = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0 \\ 1.2 \\ 2 \end{bmatrix}$$

Metoda konvergira jer je $\rho(R_J) \le \|R_J\|_\infty = 0.2 < 1$.
Broj koraka (uz $x^{(0)} = 0$)):

$$\left\|x^{(k)} - x\right\|_\infty \le \frac{\|R_J\|_\infty^k}{1 - \|R_J\|_\infty} \cdot \|c_J\|_\infty < 10^{-3}$$

Slijedi $k > 4.8614$, tj. dovoljno je uzeti $k = 5$.

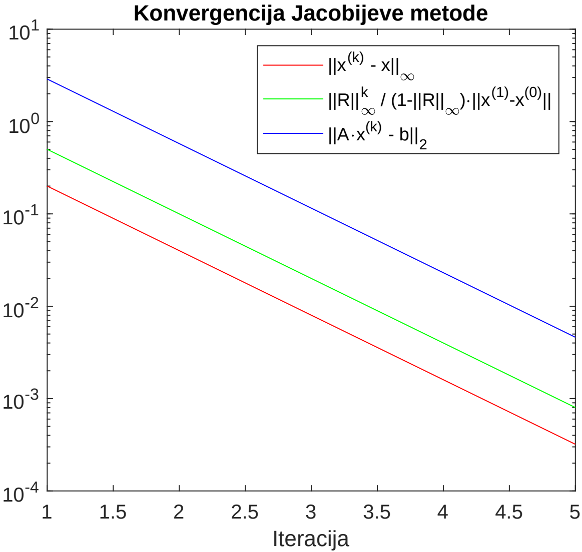
# Zadatak 3

Rješenje. Jacobi:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0 \\ 1.2 \\ 2.0 \end{bmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{bmatrix} -1 \\ -0.04 \\ 1.0 \\ 1.96 \end{bmatrix}, \quad x^{(3)} = \begin{bmatrix} -0.992 \\ 0 \\ 1.008 \\ 2.0 \end{bmatrix}$$

$$x^{(4)} = \begin{bmatrix} -1.0 \\ -0.0016 \\ 1.0 \\ 1.9984 \end{bmatrix}, \quad x^{(5)} = \begin{bmatrix} -0.99968 \\ 0 \\ 1.00032 \\ 2.0 \end{bmatrix}$$

Rješenje.


Konvergencija Jacobijeve metode
$||x^{(k)} - x||_\infty$
$||R||_\infty^k / (1-||R||_\infty)\cdot||x^{(1)}-x^{(0)}||$
$||A\cdot x^{(k)} - b||_2$
$10^1$
$10^0$
$10^{-1}$
$10^{-2}$
$10^{-3}$
$10^{-4}$
1
1.5
2
2.5
3
3.5
4
4.5
5
Iteracija

# Zadatak 3

Rješenje. Gauss-Seidel:

$$R_{GS} = -(D+L)^{-1}U = \begin{bmatrix} 0 & -0.1 & 0 & -0.1 \\ 0 & 0.01 & -0.1 & 0.01 \\ 0 & -0.001 & 0.01 & -0.101 \\ 0 & 0.0101 & -0.001 & 0.0201 \end{bmatrix}$$

$$c_{GS} = (D+L)^{-1}b = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0.08 \\ 1.192 \\ 1.9608 \end{bmatrix}$$

# Zadatak 3

Rješenje. Gauss-Seidel:

$$R_{GS} = -(D+L)^{-1}U = \begin{bmatrix} 0 & -0.1 & 0 & -0.1 \\ 0 & 0.01 & -0.1 & 0.01 \\ 0 & -0.001 & 0.01 & -0.101 \\ 0 & 0.0101 & -0.001 & 0.0201 \end{bmatrix}$$

$$c_{GS} = (D+L)^{-1}b = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0.08 \\ 1.192 \\ 1.9608 \end{bmatrix}$$

Metoda konvergira jer je $\rho(R_{GS}) \leq \|R_{GS}\|_\infty = 0.2 < 1$.

# Zadatak 3

Rješenje. Gauss-Seidel:

$$R_{GS} = -(D+L)^{-1}U = \begin{bmatrix} 0 & -0.1 & 0 & -0.1 \\ 0 & 0.01 & -0.1 & 0.01 \\ 0 & -0.001 & 0.01 & -0.101 \\ 0 & 0.0101 & -0.001 & 0.0201 \end{bmatrix}$$

$$c_{GS} = (D+L)^{-1}b = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0.08 \\ 1.192 \\ 1.9608 \end{bmatrix}$$

Metoda konvergira jer je $\rho(R_{GS}) \leq \|R_{GS}\|_\infty = 0.2 < 1$.
Broj koraka (uz $x^{(0)} = 0$):

$$\left\| x^{(k)} - x \right\|_\infty \leq \frac{\|R_{GS}\|_\infty^k}{1 - \|R_{GS}\|_\infty} \cdot \|c_{GS}\|_\infty < 10^{-3}$$

Slijedi $k > 4.8491$, tj. dovoljno je uzeti $k = 5$.

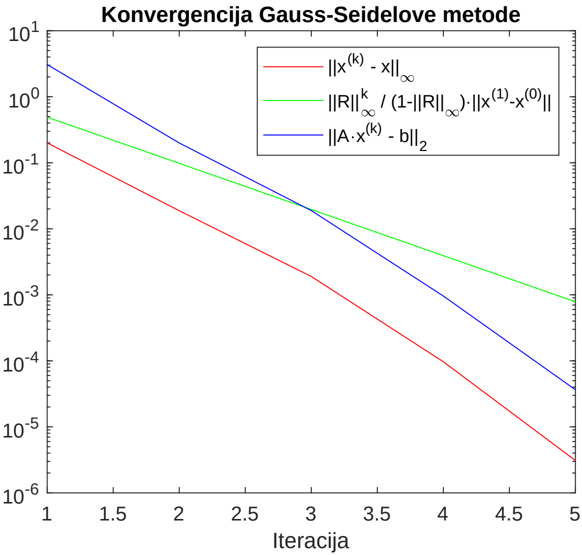
Rješenje. Gauss-Seidel:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} -0.8 \\ 0.08 \\ 1.192 \\ 1.9608 \end{bmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{bmatrix} -1.00408 \\ -0.018792 \\ 1.005799 \\ 1.99982808 \end{bmatrix}, \quad x^{(3)} = \begin{bmatrix} -0.99810 \\ -0.0007695 \\ 1.00009414 \\ 1.9998009 \end{bmatrix}$$

$$x^{(4)} = \begin{bmatrix} -0.999903 \\ -0.00001910 \\ 1.0000218 \\ 1.9999881 \end{bmatrix}, \quad x^{(5)} = \begin{bmatrix} -0.999997 \\ -0.00000249 \\ 1.0000014 \\ 1.9999995 \end{bmatrix}$$

# Zadatak 3

## Rješenje.



# JOR

Uz $\rho(R_J) \approx 1$, konvergencija Jacobijeve metode je spora.
Uvodimo parametar relaksacije $\omega$ s ciljem da smanjimo spektralni radijus matrice iteracije i ubrzamo konvergenciju.

Rastavimo $A = (\frac{1}{\omega}D) + (\frac{\omega-1}{\omega}D + L + U)$.
$D$=dijagonala, $L$=donji trokut, $U$=gornji trokut od $A$.

JOR($\omega$): $M_{JOR(\omega)} = \frac{1}{\omega}D$, $N_{JOR(\omega)} = \frac{1-\omega}{\omega}D - L - U$, odnosno,

$$
\begin{aligned}
x^{(k+1)} &= \underbrace{((1-\omega)I + \omega R_J)}_{R_{JOR(\omega)}} \cdot x^{(k)} + \underbrace{\omega D^{-1} b}_{c_{JOR(\omega)}} \\
&= (1-\omega)x^{(k)} + \omega x_J^{(k+1)}.
\end{aligned}
$$

JOR(1) = Jacobi.

# Konvergencija JOR($\omega$)

**Teorem**

*Ako konvergira Jacobijeva metoda, onda konvergira i JOR($\omega$) za svaki $\omega \in \langle 0, 1]$ i za svaku početnu iteraciju.*

*Neka je matrica sustava $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ simetrična i pozitivno definitna, te $\mu_1 \geq \mu_2 \geq \ldots \geq \mu_n$ svojstvene vrijednosti od $R_J$. Ako je $\mu_j < 1$ za sve j, onda JOR($\omega$) konvergira za:*

$$0 < \omega < \frac{2}{1 - \mu_n} \leq 2,$$

*za svaku početnu iteraciju.*
*JOR($\omega$) ne konvergira za $\omega < 0$ ni za $\omega \geq 2$.*

# Algoritam JOR($\omega$)

**Algoritam (JOR($\omega$))**

$x^{(0)}$ *zadan.*

**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$

  **for** $i = 1, 2, \ldots, n$

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

  **end**

**end**

Iz $i$-te jednadžbe izrazimo $x_i$ pomoću ostalih varijabli, napravimo težinsku sredinu s trenutnim rješenjem.
Za aproksimaciju $x_i^{(k+1)}$ koristimo vrijednosti preostalih $x$-eva iz $k$-tog koraka.

U implementaciji se koriste dva vektora za $x^{(k)}$.

# Zadatak 4

Napišite funkciju `xk = JOR(w, A, b, x0, kMax)` koja vraća aproksimaciju rješenja sustava $Ax = b$ nakon `kMax` koraka JOR($\omega$) metode s početnom iteracijom `x0`.

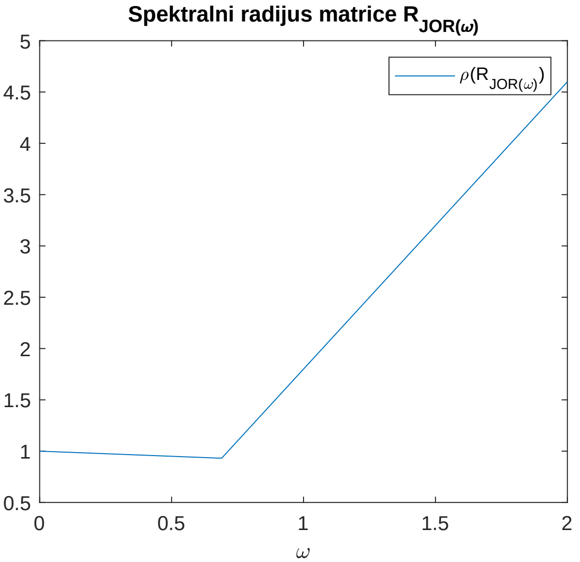
Odredite za koje $\omega \in \mathbb{R}$ metoda JOR($\omega$) konvergira ako je matrica sustava

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0.9 & 0.9 \\ 0.9 & 1 & 0.9 \\ 0.9 & 0.9 & 1 \end{bmatrix}.$$

Za koji $\omega$ je konvergencija najbrža?

# Zadatak 4

Rješenje. Napravite ovaj graf uz samo 1 poziv funkcije `eig`!



# Zadatak 4

Rješenje. Za $\omega = 0.689655$, `b=[1;2;3]`, `x0=[0;0;0]`:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 0.689655 \\ 1.37931 \\ 2.068965 \end{bmatrix}, \; x^{(2)} = \begin{bmatrix} -1.236622 \\ 0.0951254 \\ 1.426873 \end{bmatrix}, \; x^{(3)} = \begin{bmatrix} -0.638813 \\ 1.2907449 \\ 3.220302 \end{bmatrix}$$

$$x^{(4)} = \begin{bmatrix} -2.308557 \\ 0.1775825 \\ 2.663722 \end{bmatrix}, \; x^{(5)} = \begin{bmatrix} -1.790362 \\ 1.2139745 \\ 4.218311 \end{bmatrix}, \; x^{(120)} = \begin{bmatrix} -9.283961 \\ 0.7141508 \\ 10.71226 \end{bmatrix}$$

# SOR

Uz $\rho(R_{GS}) \approx 1$, konvergencija Gauss-Seidelove metode je spora. Uvodimo parametar relaksacije $\omega$ s ciljem da smanjimo spektralni radijus matrice iteracije i ubrzamo konvergenciju.

Rastavimo $A = (\frac{1}{\omega}D + L) + (\frac{\omega-1}{\omega}D + U)$.
$D$=dijagonala, $L$=donji trokut, $U$=gornji trokut od $A$.

SOR($\omega$): $M_{SOR(\omega)} = \frac{1}{\omega}D + L$, $N_{SOR(\omega)} = \frac{1-\omega}{\omega}D - U$, odnosno,

$$\begin{aligned} x^{(k+1)} &= \underbrace{(D+\omega L)^{-1}((1-\omega)D - \omega U)}_{R_{SOR(\omega)}} \cdot x^{(k)} + \underbrace{\omega(D+\omega L)^{-1}b}_{c_{SOR(\omega)}} \\ &\neq (1-\omega)x^{(k)} + \omega x_{GS}^{(k+1)}. \end{aligned}$$

Ali, $x_i^{(k+1)} = (1-\omega)x_i^{(k)} + \omega x_{i,GS}^{(k+1)}$.

SOR(1) = Gauss-Seidel.

# Konvergencija SOR($\omega$)

**Teorem**

*Ako je matrica sustava $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ simetrična i pozitivno definitna, onda SOR($\omega$) konvergira za svaki $\omega \in \langle 0, 2\rangle$.*

*SOR($\omega$) ne konvergira za $\omega < 0$ ni za $\omega \geq 2$.*

# Algoritam SOR($\omega$)

**Algoritam (SOR($\omega$))**

$x^{(0)}$ *zadan.*

**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$

  **for** $i = 1, 2, \ldots, n$

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

  **end**

**end**

Iz $i$-te jednadžbe izrazimo $x_i$ pomoću ostalih varijabli, napravimo težinsku sredinu s trenutnim rješenjem.

Za aproksimaciju $x_i^{(k+1)}$ koristimo vrijednosti preostalih $x$-eva:

- iz $k+1$-vog koraka ako smo ih već ranije izračunali: $x_1^{(k+1)}, x_2^{(k+1)}, \ldots, x_{i-1}^{(k+1)}$;
- iz $k$-tog koraka ako ih još nismo izračunali: $x_{i+1}^{(k)}, x_{i+2}^{(k)}, \ldots, x_n^{(k)}$.

U implementaciji se koristi samo jedan vektor za $x^{(k)}$.

# Zadatak 5

Napišite funkciju `xk = SOR(w, A, b, x0, kMax)` koja vraća aproksimaciju rješenja sustava $Ax = b$ nakon `kMax` koraka SOR($\omega$) metode s početnom iteracijom `x0`.

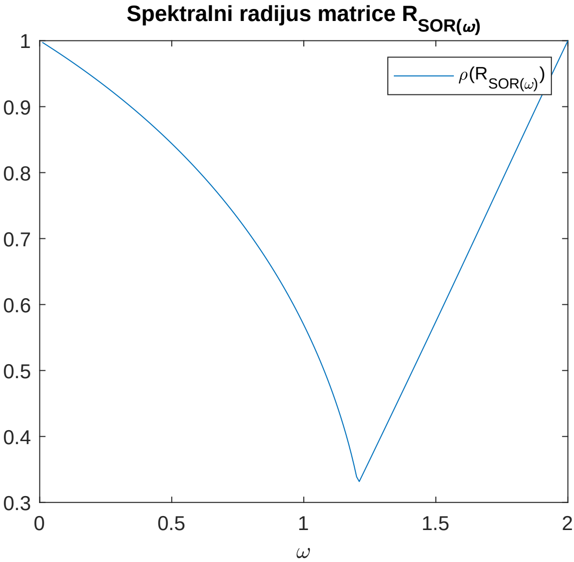
Grafički odredite za koje $\omega \in \mathbb{R}$ metoda SOR($\omega$) konvergira ako je matrica sustava

$$A = \begin{bmatrix} 16 & -4 & 8 & 12 \\ -4 & 4 & -7 & 3 \\ 8 & -7 & 78 & 32 \\ 12 & 3 & 32 & 113 \end{bmatrix}.$$

Grafički odredite $\omega$ za kojeg je konvergencija najbrža.
Riješite sustav uz `b=[32; -4; 111; 160]` za $\omega = 1$ i za optimalni $\omega$ tako da bude $\left\|Ax^{(k)} - b\right\| < 10^{-5}$.

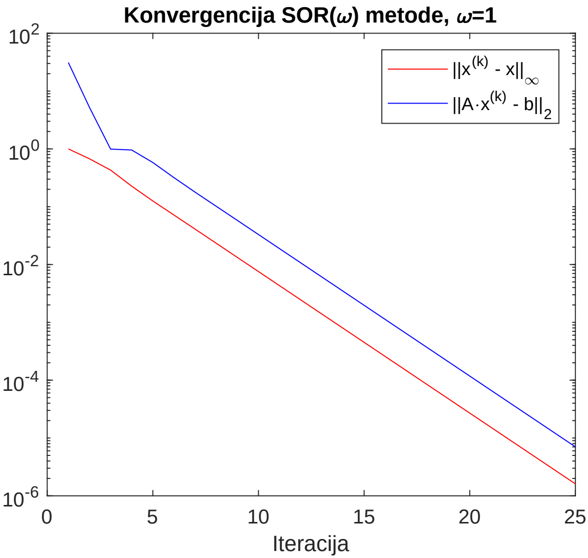
# Zadatak 5

Rješenje.



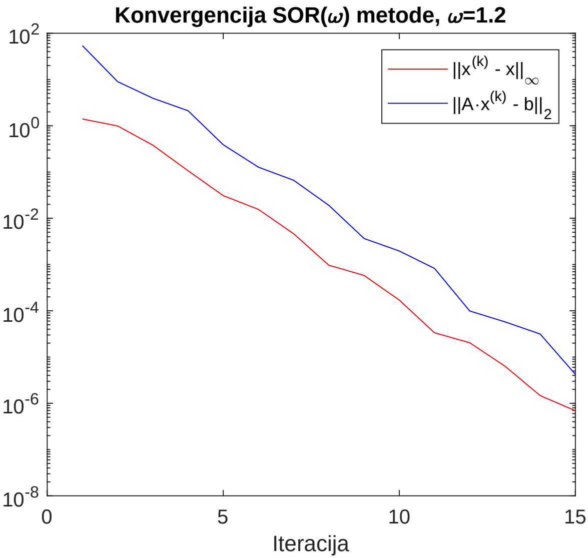
# Zadatak 5

Rješenje. $\omega = 1 \Rightarrow 25$ iteracija



# Zadatak 5

Rješenje. $\omega = 1.2 \Rightarrow 15$ iteracija



Rješenje. Za $\omega = 1.2$:

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 2.4 \\ 1.68 \\ 1.593230 \\ 0.798335 \end{bmatrix}, \quad x^{(2)} = \begin{bmatrix} 0.749559 \\ 1.990753 \\ 1.118154 \\ 1.000531 \end{bmatrix}, \quad x^{(3)} = \begin{bmatrix} 1.275942 \\ 1.380626 \\ 0.983135 \\ 0.958333 \end{bmatrix}$$

$$x^{(4)} = \begin{bmatrix} 1.106617 \\ 1.053899 \\ 1.016567 \\ 0.987399 \end{bmatrix}, \quad x^{(5)} = \begin{bmatrix} 0.996246 \\ 1.030848 \\ 1.006674 \\ 0.999747 \end{bmatrix}, \quad x^{(15)} = \begin{bmatrix} 1.000000 \\ 1.000000 \\ 1.000000 \\ 0.999999 \end{bmatrix}$$

# APROKSIMACIJE IZ KRILOVLJEVIH POTPROSTORA

# Inverz matrice kao polinom

Karakteristični polinom matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$:

$$\kappa_A(\xi) := \det(A - \xi I) = a_n \xi^n + a_{n-1}\xi^{n-1} + \ldots + a_1 \xi + a_0$$

# Inverz matrice kao polinom

Karakteristični polinom matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$:

$$\kappa_A(\xi) := \det(A - \xi I) = a_n \xi^n + a_{n-1}\xi^{n-1} + \ldots + a_1 \xi + a_0$$

Matrica poništava svoj karakteristični polinom:

$$\kappa_A(A) = a_n \cdot A^n + a_{n-1} \cdot A^{n-1} + \ldots + a_1 \cdot A + a_0 I = 0$$

# Inverz matrice kao polinom

Karakteristični polinom matrice $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$:

$$\kappa_A(\xi) := \det(A - \xi I) = a_n \xi^n + a_{n-1} \xi^{n-1} + \ldots + a_1 \xi + a_0$$

Matrica poništava svoj karakteristični polinom:

$$\kappa_A(A) = a_n \cdot A^n + a_{n-1} \cdot A^{n-1} + \ldots + a_1 \cdot A + a_0 I = 0$$

Ako je $A$ regularna, onda $a_0 \neq 0$ i

$$A^{-1} = -\frac{1}{a_0} \left( a_n \cdot A^{n-1} + a_{n-1} \cdot A^{n-2} + \ldots + a_2 \cdot A + a_1 I \right)$$

# Inverz matrice kao polinom

Karakteristični polinom matrice $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$:

$$\kappa_A(\xi) := \det(A - \xi I) = a_n\xi^n + a_{n-1}\xi^{n-1} + \ldots + a_1\xi + a_0$$

Matrica poništava svoj karakteristični polinom:

$$\kappa_A(A) = a_n \cdot A^n + a_{n-1} \cdot A^{n-1} + \ldots + a_1 \cdot A + a_0 I = 0$$

Ako je $A$ regularna, onda $a_0 \neq 0$ i

$$A^{-1} = -\frac{1}{a_0}\left(a_n \cdot A^{n-1} + a_{n-1} \cdot A^{n-2} + \ldots + a_2 \cdot A + a_1 I\right)$$

Dakle, $A^{-1} = p(A)$, za neki polinom stupnja $n-1$.
Ako je $Ax = b$, onda $x = A^{-1}b = p(A)b$.

Za vektor $v \in \mathbb{C}^n$ definiramo Krilovljev potprostor

$$\mathcal{K}_k(A, v) := \mathrm{span}\{v, Av, A^2v, \ldots, A^{k-1}v\}.$$

Dakle, ako je $Ax = b$, onda je $x \in \mathcal{K}_n(A, b)$.

# Krilovljevi potprostori

Za vektor $v \in \mathbb{C}^n$ definiramo Krilovljev potprostor

$$\mathcal{K}_k(A, v) := \mathrm{span}\{v, Av, A^2 v, \ldots, A^{k-1} v\}.$$

Dakle, ako je $Ax = b$, onda je $x \in \mathcal{K}_n(A, b)$.

Očekujemo da će već za $k \ll n$ u prostoru $\mathcal{K}_k(A, b)$ postojati dobre aproksimacije za $x$.

# Krilovljevi potprostori

Za vektor $v \in \mathbb{C}^n$ definiramo Krilovljev potprostor

$$\mathcal{K}_k(A, v) := \mathrm{span}\{v, Av, A^2v, \ldots, A^{k-1}v\}.$$

Dakle, ako je $Ax = b$, onda je $x \in \mathcal{K}_n(A, b)$.

Očekujemo da će već za $k \ll n$ u prostoru $\mathcal{K}_k(A, b)$ postojati dobre aproksimacije za $x$.

Zašto Krilovljevi potprostori?

- Matrica sustava $A$ je toliko velika ili je tako zadana da je jedina operacija koju možemo s njom izvesti oblika $v \mapsto Av$ (tzv. "matvec").

Brzinu konvergencije obično mjerimo u broju operacija $v \mapsto Av$.

# Metoda najbržeg silaska

Oznake:

- $x^{(k)}$ – k-ta iteracija
- $e^{(k)} = x - x^{(k)}$ – greška u k-tom koraku
- $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ – rezidual u k-tom koraku

Uoči: $r^{(k)} = Ae^{(k)}$.

# Metoda najbržeg silaska

Oznake:

- $x^{(k)}$ – k-ta iteracija
- $e^{(k)} = x - x^{(k)}$ – greška u k-tom koraku
- $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ – rezidual u k-tom koraku

Uoči: $r^{(k)} = Ae^{(k)}$.

Iteracije:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k(b - Ax^{(k)}) = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)} = x^{(k)} + \alpha_k Ae^{(k)}$$

Vrijednost $\alpha_k$ ćemo odabrati tako da $x^{(k+1)}$ bude u nekom smislu optimalan.

# Metoda najbržeg silaska

Oznake:

- $x^{(k)}$ – k-ta iteracija
- $e^{(k)} = x - x^{(k)}$ – greška u k-tom koraku
- $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ – rezidual u k-tom koraku

Uoči: $r^{(k)} = Ae^{(k)}$.

Iteracije:

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k(b - Ax^{(k)}) = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)} = x^{(k)} + \alpha_k Ae^{(k)}$$

Vrijednost $\alpha_k$ ćemo odabrati tako da $x^{(k+1)}$ bude u nekom smislu optimalan.

Uoči: $e^{(k+1)} = e^{(k)} - \alpha_k Ae^{(k)}$, $r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k Ar^{(k)}$.

Uoči:

$$
\begin{aligned}
x^{(0)} &= x - e^{(0)} \in x + \mathrm{span}\{e^{(0)}\} \\
x^{(1)} &= x^{(0)} + \alpha_0 A e^{(0)} = x - e^{(0)} + \alpha_0 A e^{(0)} \in x + \mathrm{span}\{e^{(0)}, Ae^{(0)}\} \\
x^{(2)} &= x^{(1)} + \alpha_1 A e^{(1)} = x^{(1)} + \alpha_1 A(e^{(0)} - \alpha_0 A e^{(0)}) \\
&\in x + \mathrm{span}\{e^{(0)}, Ae^{(0)}, A^2 e^{(0)}\} \\
&\dots \\
x^{(k)} &\in x + \mathcal{K}_{k+1}(e^{(0)}, A)
\end{aligned}
$$

# Metoda najbržeg silaska

Kako odabrati $\alpha_k$?

- $\left\|e^{(k+1)}\right\| \longrightarrow \min$? Ali $e^{(k+1)} = x - x^{(k+1)}$, $x$ nepoznat

# Metoda najbržeg silaska

Kako odabrati $\alpha_k$?

- $\left\|e^{(k+1)}\right\| \longrightarrow \min$? Ali $e^{(k+1)} = x - x^{(k+1)}$, $x$ nepoznat

Definiramo *A*-normu i *A*-skalarni produkt: za simetričnu, pozitivno definitnu $A$ i vektor $v$ je

$$\|v\|_A := \sqrt{v^{\mathsf{T}} A v}, \quad \langle u, v\rangle_A := v^{\mathsf{T}} A u$$

(DZ: Dokažite da su ovo zaista norma, odnosno skal. produkt.)

# Metoda najbržeg silaska

Kako odabrati $\alpha_k$?

- $\left\| e^{(k+1)} \right\| \longrightarrow \min$? Ali $e^{(k+1)} = x - x^{(k+1)}$, $x$ nepoznat

Definiramo *A-normu* i *A-skalarni produkt*: za simetričnu, pozitivno definitnu $A$ i vektor $v$ je

$$\|v\|_A := \sqrt{v^\mathsf{T} A v}, \quad \langle u, v \rangle_A := v^\mathsf{T} A u$$

(DZ: Dokažite da su ovo zaista norma, odnosno skal. produkt.)

Definirajmo $f(\alpha_k) := \left\| e^{(k+1)} \right\|_A$.
Cilj: naći $\alpha_k$ tako da $f(\alpha_k)$ minimalno.

# Metoda najbržeg silaska

$$
\begin{aligned}
f(\alpha_k) &= (e^{(k+1)})^\mathsf{T} A e^{(k+1)} \\
&= (e^{(k+1)})^\mathsf{T} r^{(k+1)} \\
&= (e^{(k)} - \alpha_k A e^{(k)})^\mathsf{T} (r^{(k)} - \alpha_k A r^{(k)}) \\
&= (e^{(k)} - \alpha_k r^{(k)})^\mathsf{T} (r^{(k)} - \alpha_k A r^{(k)}) \\
&= \alpha_k^2 \cdot (r^{(k)})^\mathsf{T} A r^{(k)} - 2\alpha_k (r^{(k)})^\mathsf{T} r^{(k)} + (e^{(k)})^\mathsf{T} A e^{(k)} \\
&\longrightarrow \min_{\alpha_k}
\end{aligned}
$$

# Metoda najbržeg silaska

$$
\begin{aligned}
f(\alpha_k) &= (e^{(k+1)})^\top A e^{(k+1)} \\
&= (e^{(k+1)})^\top r^{(k+1)} \\
&= (e^{(k)} - \alpha_k A e^{(k)})^\top (r^{(k)} - \alpha_k A r^{(k)}) \\
&= (e^{(k)} - \alpha_k r^{(k)})^\top (r^{(k)} - \alpha_k A r^{(k)}) \\
&= \alpha_k^2 \cdot (r^{(k)})^\top A r^{(k)} - 2\alpha_k (r^{(k)})^\top r^{(k)} + (e^{(k)})^\top A e^{(k)} \\
&\longrightarrow \min_{\alpha_k}
\end{aligned}
$$

Uvjet optimalnosti:

$$0 = f'(\alpha_k) = 2\alpha_k (r^{(k)})^\top A r^{(k)} - 2(r^{(k)})^\top r^{(k)}$$

Slijedi:

$$\alpha_k = \frac{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{(r^{(k)})^\top A r^{(k)}}.$$

# Metoda najbržeg silaska

**Algoritam (Metoda najbržeg silaska: $A$ simetrična, poz. definitna)**

$x^{(0)}$ *zadan.*
$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$
**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$
$\quad \alpha_k = \frac{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{(r^{(k)})^\top A r^{(k)}}$
$\quad x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k r^{(k)}$
$\quad r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A r^{(k)}$
**end**

Uoči:

$$(r^{(k)})^\mathsf{T} r^{(k+1)} = (r^{(k)})^\mathsf{T} r^{(k)} - \alpha_k (r^{(k)})^\mathsf{T} A r^{(k)}) = 0,$$

tj. rezidual $r^{(k+1)} = Ae^{(k+1)}$ je okomit (pazi, ne $A$-okomit!) na $r^{(k)}$, pa je $e^{(k+1)}$ $A$-okomit na $r^{(k)}$.

Uoči:

$$(r^{(k)})^\mathsf{T} r^{(k+1)} = (r^{(k)})^\mathsf{T} r^{(k)} - \alpha_k (r^{(k)})^\mathsf{T} A r^{(k)}) = 0,$$

tj. rezidual $r^{(k+1)} = Ae^{(k+1)}$ je okomit (pazi, ne $A$-okomit!) na $r^{(k)}$, pa je $e^{(k+1)}$ $A$-okomit na $r^{(k)}$.

Zato možemo primjeniti $A$-Pitagorin poučak:

$$\left\|e^{(k)}\right\|_A^2 = \left\|e^{(k+1)} + \alpha_k r^{(k)}\right\|_A^2 = \left\|e^{(k+1)}\right\|_A^2 + \alpha_k^2 \left\|r^{(k)}\right\|_A^2 > \left\|e^{(k+1)}\right\|_A^2,$$

to jest, greška monotono pada.
(Ako je $r^{(k)} = 0$, onda je $x^{(k)}$ egzaktno rješenje od $Ax = b$.)

**Teorem (konvergencija metode najbržeg silaska)**

*Neka je $A$ simetrična, pozitivno definitna matrica, te neka je*

$$\kappa = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}.$$

*Tada vrijedi:*

$$\left\| e^{(k)} \right\|_A \leq \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \cdot \left\| e^{(k-1)} \right\|_A,$$

*odnosno,*

$$\left\| e^{(k)} \right\|_A \leq \left( \frac{\kappa - 1}{\kappa + 1} \right)^k \cdot \left\| e^{(0)} \right\|_A.$$

# Zadatak 6

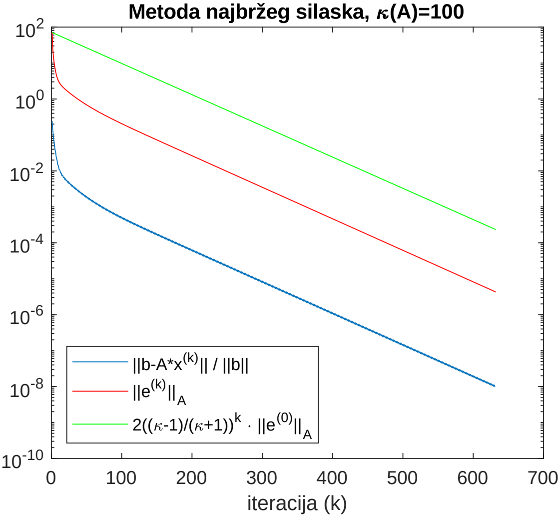
Napišite funkciju `x=najbrziSilazak(A,b,x0)` koja metodom najbržeg silaska računa aproksimaciju rješenja linearnog sustava $Ax = b$, uz početnu iteraciju `x0`. Iteracije zaustavite kada bude $\left\|r^{(k)}\right\| / \|b\| < 10^{-8}$.

Metodu testirajte za matricu $A = U\Lambda U^{\mathsf{T}}$, pri čemu je $U$ slučajna ortogonalna matrica, te $\Lambda = diag(1, 2, \ldots, 100)$. Neka je $x0 = 0$, te $b$ takav da je vektor `x=[1; 1; ...; 1]` egzaktno rješenje sustava.

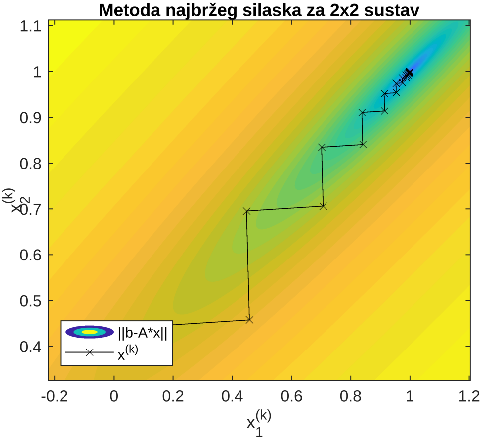
Usporedite $e^{(k)}$ s ocjenom iz Teorema o konvergenciji.

## Zadatak 6

Rješenje.



Metoda najbržeg silaska često radi korake u smjeru koji se već ranije pojavio (tj. $r^{(k)}$ se može ponavljati) $\rightarrow$ potencijalno spora konv.



Rješenje: unaprijed odaberemo skup $A$-ortogonalnih vektora $\{d_0, d_1, \ldots, d_{n-1}\}$ i definiramo

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} + \alpha_k d_k.$$

Uoči: $e^{(k+1)} = e^{(k)} - \alpha_k d_k$, $r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d_k$.

# Metoda konjugiranih smjerova

Rješenje: unaprijed odaberemo skup $A$-ortogonalnih vektora $\{d_0, d_1, \ldots, d_{n-1}\}$ i definiramo

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} + \alpha_k d_k.$$

Uoči: $e^{(k+1)} = e^{(k)} - \alpha_k d_k$, $r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d_k$.

Skalar $\alpha_k$ opet odaberemo tako da je $\left\| e^{(k+1)} \right\|_A$ minimalna, tj.

$$\alpha_k = \frac{d_k^{\mathsf{T}} r^{(k)}}{d_k^{\mathsf{T}} A d_k}.$$

# Metoda konjugiranih smjerova

Lako se vidi da $\langle e^{(k)}, d_0\rangle_A = \langle e^{(k)}, d_1\rangle_A = \ldots = \langle e^{(k)}, d_{k-1}\rangle_A = 0$, te

$$e^{(k)} \in \mathrm{span}\{d_k, d_{k+1}, \ldots, d_{n-1}\}.$$

Preciznije, ako je

$$e^{(0)} = \xi_0 d_0 + \xi_1 d_1 + \ldots + \xi_k d_k + \xi_{k+1} d_{k+1} + \ldots + \xi_{n-1} d_{n-1},$$

onda je

$$e^{(k)} = \qquad \xi_k d_k + \xi_{k+1} d_{k+1} + \ldots + \xi_{n-1} d_{n-1}.$$

Dakle, $e^{(n)} = 0$, tj. metoda (u egzaktnoj aritmetici) daje egzaktno rješenje u $n$ koraka.

# Metoda konjugiranih smjerova

**Algoritam** (Metoda konjugiranih smjerova: $A$ **simetrična, poz. definitna**)

$x^{(0)}$ *zadan.*
*Odaberi* $d_0, d_1, \ldots, d_{n-1}$ *tako da budu A-ortogonalni.*
$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$
**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$
  $\alpha_k = \frac{d_k^T r^{(k)}}{d_k^T A d_k}$
  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d_k$
  $r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d_k$
**end**

# Metoda konjugiranih smjerova

Neka svojstva:

$$d_j^\mathsf{T} A d_i = 0,\ i \neq j$$

$$d_j^\mathsf{T} r^{(k)} = d_j^\mathsf{T} A e^{(k)} = 0,\ j < k$$

$$d_j^\mathsf{T} r^{(0)} = d_j^\mathsf{T} r^{(1)} = \ldots = d_j^\mathsf{T} r^{(j)}$$

$$\alpha_k = \frac{d_k^\mathsf{T} r^{(0)}}{d_k^\mathsf{T} A d_k}$$

# Metoda konjugiranih smjerova

Neka svojstva:

$$d_j^\top A d_i = 0,\ i \neq j$$

$$d_j^\top r^{(k)} = d_j^\top A e^{(k)} = 0,\ j < k$$

$$d_j^\top r^{(0)} = d_j^\top r^{(1)} = \ldots = d_j^\top r^{(j)}$$

$$\alpha_k = \frac{d_k^\top r^{(0)}}{d_k^\top A d_k}$$

Kako odabrati $d_0, d_1, \ldots, d_{n-1}$?
$A$-Gram-Schmidtovim postupkom na linearno nezavisne vektore $u_0, u_1, \ldots, u_{n-1}$:

$$d_k = u_k - \beta_0 d_0 - \beta_1 d_1 - \ldots - \beta_{k-1} d_{k-1},$$

$$\beta_j = \frac{\langle u_k, d_j \rangle_A}{\langle d_j, d_j \rangle_A} = \frac{d_j^\top A u_k}{d_j^\top A d_j}.$$

# Zadatak 7

Napišite funkciju `Q=mgsA(A,X)` koja modificiranim A-Gram-Schmidtovim postupkom redom A-ortogonalizira stupce matrice `X` i sprema ih kao stupce matrice `Q`.

Napišite funkciju `x=konjugiraniSmjerovi(A,b,x0,D)` koja metodom konjugiranih smjerova računa aproksimaciju rješenja linearnog sustava $Ax = b$, uz početnu iteraciju `x0`. Iteracije zaustavite kada bude $\left\|r^{(k)}\right\| \,/\, \|b\| < 10^{-8}$. Konjugirani smjerovi su stupci matrice `D`.

Metodu testirajte za matricu $A = U\Lambda U^\top$, pri čemu je $U$ slučajna ortogonalna matrica, te $\Lambda = diag(1, 2, \ldots, 100)$. Neka je $x0 = 0$, te $b$ takav da je vektor `x=[1; 1; ... 1]` egzaktno rješenje sustava.

Usporedite s metodom najbržeg silaska.

# Metoda konjugiranih gradijenata

Metoda konjugiranih gradijenata (CG):

- metoda konjugiranih smjerova
- $d_0, \ldots, d_{n-1}$ dobivamo $A$-Gram-Schmidtovim postupkom na vektorima $r^{(0)}, r^{(1)}, \ldots, r^{(n-1)}$.

Metoda konjugiranih gradijenata (CG):

- metoda konjugiranih smjerova
- $d_0, \ldots, d_{n-1}$ dobivamo $A$-Gram-Schmidtovim postupkom na vektorima $r^{(0)}, r^{(1)}, \ldots, r^{(n-1)}$.

Pokazat ćemo:

$$d_k = r^{(k)} - \beta_{k-1} d_{k-1}, \quad \beta_{k-1} = \frac{-(r^{(k)})^\mathsf{T} r^{(k)}}{(r^{(k-1)})^\mathsf{T} r^{(k-1)}}$$

tj. $\beta_0 = \beta_1 = \ldots = \beta_{k-2} = 0$ u $A$-Gram-Schmidtovom postupku

$$d_k = r^{(k)} - \beta_0 d_0 - \beta_1 d_1 - \ldots - \beta_{k-1} d_{k-1}.$$

Svojstvo $A$-Gram-Schmidtovog postupka:

$$\mathrm{span}\{d_0, d_1, \ldots, d_{k-1}\} = \mathrm{span}\{r^{(0)}, r^{(1)}, \ldots, r^{(k-1)}\}.$$

Kako je CG metoda konjugiranih smjerova, vrijedi $d_j^\top r^{(k)} = 0$, za $j < k$, pa onda i

$$(r^{(j)})^\top r^{(k)} = 0, \ i \neq j.$$

$$d_k = r^{(k)} - \beta_0 d_0 - \beta_1 d_1 - \ldots - \beta_{k-1} d_{k-1},$$

$$\beta_j = \frac{d_j^\top A r^{(k)}}{d_j^\top A d_j}$$

Uoči: $(r^{(j+1)})^\top r^{(k)} = (r^{(j)})^\top r^{(k)} - \alpha_j d_j^\top A r^{(k)}$, pa je

$$d_j^\top A r^{(k)} = 0, \ j < k-1$$

$$d_{k-1}^\top A r^{(k)} = \frac{-(r^{(k)})^\top r^{(k)} + (r^{(k-1)})^\top r^{(k)}}{\alpha_{k-1}} = \frac{-(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{\alpha_{k-1}} = \frac{-(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{\alpha_{k-1}},$$

Slijedi $\beta_j = 0$, za $j = 0, 1, \ldots, k-2$, te

$$\beta_{k-1} = \frac{-(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{\alpha_{k-1} d_{k-1}^\top A d_{k-1}} = \frac{-(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{d_{k-1}^\top r^{(k-1)}} = \frac{-(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{(r^{(k-1)})^\top r^{(k-1)}},$$

jer je $\alpha_{k-1} = \frac{d_{k-1}^\top r^{(k-1)}}{d_{k-1}^\top A d_{k-1}}$, te $d_{k-1} = r^{(k-1)} - \xi d_{k-2}$, a $d_{k-2}^\top r^{(k-1)} = 0$.

Slično, zbog $d_k^\top r^{(k)} = (r^{(k)})^\top r^{(k)}$, možemo pisati

$$\alpha_k = \frac{d_k^\top r^{(k)}}{d_k^\top A d_k} = \frac{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{d_k^\top A d_k}.$$

# Metoda konjugiranih gradijenata

**Algoritam (Metoda konjugiranih gradijenata: $A$ simetrična, poz. def.)**

$x^{(0)}$ *zadan.*

$d_0 = r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$

**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$

$\quad \alpha_k = \frac{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}{d_k^\top A d_k}$

$\quad x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d_k$

$\quad r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d_k$

$\quad \beta_k = \frac{-(r^{(k+1)})^\top r^{(k+1)}}{(r^{(k)})^\top r^{(k)}}$

$\quad d_{k+1} = r^{(k+1)} - \beta_k d_k$

**end**

Može se pokazati da vektor $e^{(k)}$ ima najmanju $A$-normu od svih vektora iz mnogostrukosti

$$e^{(0)} + \mathrm{span}\{Ae^{(0)}, A^2 e^{(0)}, \ldots, A^k e^{(0)}\}.$$

Može se pokazati da vektor $e^{(k)}$ ima najmanju $A$-normu od svih vektora iz mnogostrukosti

$$e^{(0)} + \mathrm{span}\{Ae^{(0)}, A^2e^{(0)}, \ldots, A^ke^{(0)}\}.$$

Možemo pisati:

$$e^{(k)} = e^{(0)} + \tau_1 Ae^{(0)} + \tau_2 A^2e^{(0)} + \ldots + \tau_k A^ke^{(0)} = \pi(A)e^{(0)},$$

za neki polinom $\pi \in \mathcal{P}_k$ stupnja $k$ takav da je $\pi(0) = 1$.

Može se pokazati da vektor $e^{(k)}$ ima najmanju $A$-normu od svih vektora iz mnogostrukosti

$$e^{(0)} + \mathrm{span}\{Ae^{(0)}, A^2e^{(0)}, \ldots, A^ke^{(0)}\}.$$

Možemo pisati:

$$e^{(k)} = e^{(0)} + \tau_1 Ae^{(0)} + \tau_2 A^2 e^{(0)} + \ldots + \tau_k A^k e^{(0)} = \pi(A)e^{(0)},$$

za neki polinom $\pi \in \mathcal{P}_k$ stupnja $k$ takav da je $\pi(0) = 1$.

Dakle, ako je $\hat{\pi}$ polinom za kojeg se postiže

$$\min_{\substack{\pi \in \mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \left\| \pi(A)e^{(0)} \right\|_A ,$$

onda je $e^{(k)} = \hat{\pi}(A)e^{(0)}$.

# Metoda konjugiranih gradijenata – konvergencija

Za poz.def. $A = U\Lambda U^\top$ je $A^{1/2} = U\Lambda^{1/2}U^\top$ i $\pi(A) = U\pi(\Lambda)U^\top$, pa imamo:

$$\begin{aligned}
\left\|e^{(k)}\right\|_A &= \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k\\ \pi(0)=1}} \left\|\pi(A)e^{(0)}\right\|_A \\
&= \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k\\ \pi(0)=1}} \sqrt{(e^{(0)})^\top\pi(A)^\top A\pi(A)e^{(0)}} \\
&= \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k\\ \pi(0)=1}} \sqrt{(e^{(0)})^\top\pi(A)^\top A^{1/2}A^{1/2}\pi(A)e^{(0)}} \\
&= \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k\\ \pi(0)=1}} \left\|A^{1/2}\pi(A)e^{(0)}\right\|_2 = \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k\\ \pi(0)=1}} \left\|\pi(A)A^{1/2}e^{(0)}\right\|_2 \\
&\leq \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k\\ \pi(0)=1}} \|\pi(A)\|_2 \cdot \left\|A^{1/2}e^{(0)}\right\|_2 \\
&= \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k\\ \pi(0)=1}} \|\pi(\Lambda)\|_2 \cdot \left\|e^{(0)}\right\|_A
\end{aligned}$$

# Metoda konjugiranih gradijenata – konvergencija

Vrijedi:

$$\min_{\substack{\pi \in \mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \|\pi(\Lambda)\|_2 = \min_{\substack{\pi \in \mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \max_{\lambda \in \Lambda(A)} |\pi(\lambda)|.$$

Ocjenu za $e^{(k)}$ dobivamo tako da za $\pi$ uvrstimo neki konkretni polinom stupnja $k$ za kojeg vrijedi $\pi(0) = 1$.
Uvrštavanjem Čebiševljevog polinoma za interval $[\lambda_{\min}(A), \lambda_{\max}(A)]$ dobivamo:

**Teorem (konvergencija metode konjugiranih gradijenata)**

*Neka je $A$ simetrična, pozitivno definitna matrica, te neka je $\kappa = \frac{\lambda_{\max}(A)}{\lambda_{\min}(A)}$. Tada:*

$$\left\| e^{(k)} \right\|_A \leq 2 \left( \frac{\sqrt{\kappa} - 1}{\sqrt{\kappa} + 1} \right)^k \cdot \left\| e^{(0)} \right\|_A .$$

# Zadatak 8

Napišite funkciju `x=CG(A,b,x0)` koja CG-metodom računa aproksimaciju rješenja linearnog sustava $Ax = b$, uz početnu iteraciju `x0`. Iteracije zaustavite kada bude $\left\|r^{(k)}\right\| / \|b\| < 10^{-8}$.

Metodu testirajte za matricu $A = U\Lambda U^\top$, pri čemu je $U$ slučajna ortogonalna matrica, te

(a) $\Lambda = diag(1, 2^2, 3^2, \ldots, 100^2)$.

(b) $\Lambda = diag(1, 2, 3, \ldots, 100)$.

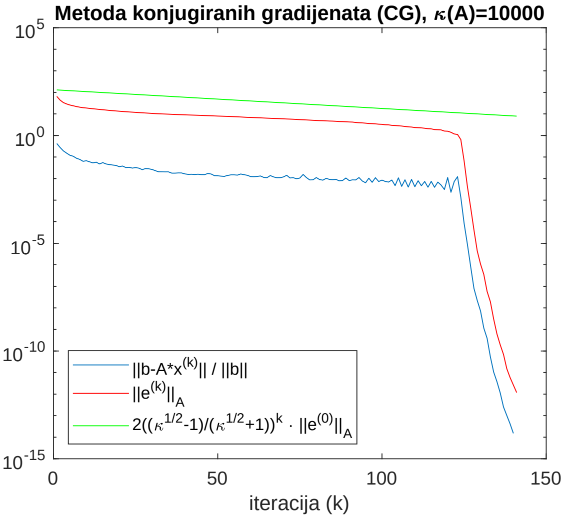
(c) $\Lambda = diag(1, 1, 3, 3, 5, 5, \ldots, 97, 97, 99, 100)$.

(d) $\Lambda = diag(\underbrace{1, \ldots, 1}_{10}, \underbrace{20, \ldots, 20}_{10}, \ldots, 90, \underbrace{100, \ldots, 100}_{10})$.

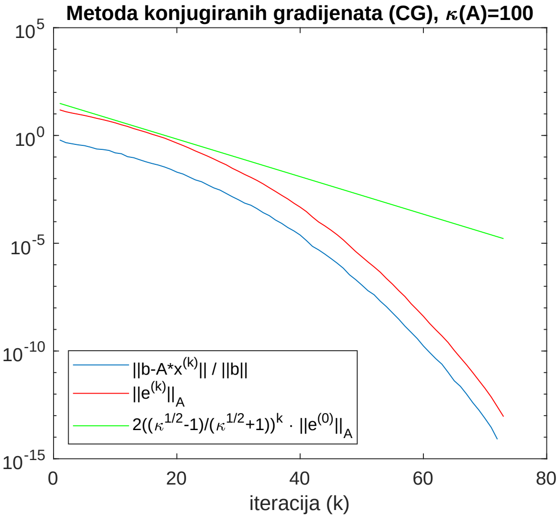
Neka je $x0 = 0$, te $b$ takav da je vektor `x=[1; 1; ...; 1]` egzaktno rješenje sustava.

Usporedite sa ocjenom iz teorema i objasnite dobivene rezultate!

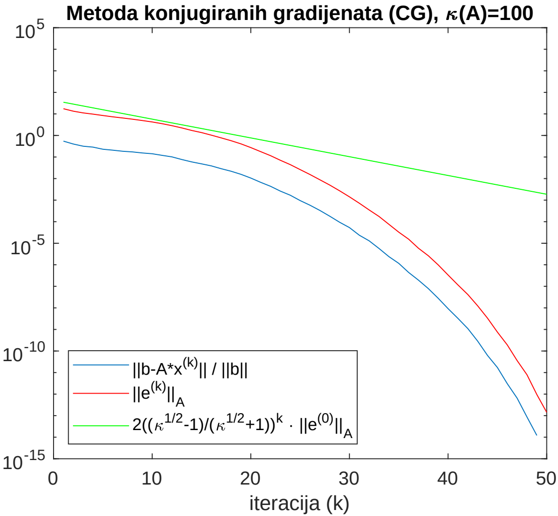
Rješenje. (a)


Metoda konjugiranih gradijenata (CG), κ(A)=10000
10^5
10^0
10^-5
10^-10
10^-15
0
50
100
150
iteracija (k)
||b-A*x^(k)|| / ||b||
||e^(k)||_A
2((κ^1/2-1)/(κ^1/2+1))^k · ||e^(0)||_A

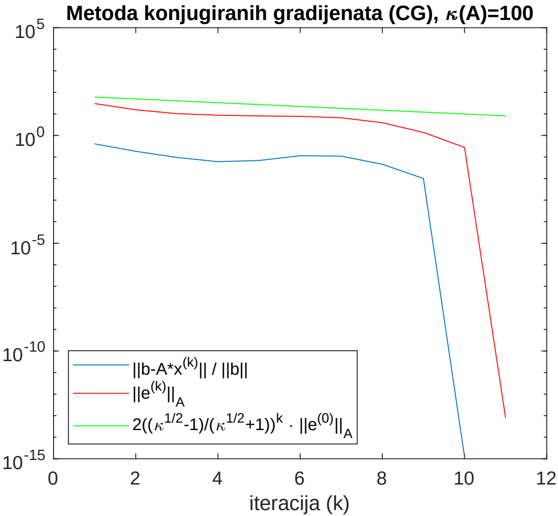
Rješenje. (b)


Metoda konjugiranih gradijenata (CG), κ(A)=100
10^5
10^0
10^-5
10^-10
10^-15
0
20
40
60
80
iteracija (k)
||b-A*x^(k)|| / ||b||
||e^(k)||_A
2((κ^1/2-1)/(κ^1/2+1))^k · ||e^(0)||_A

Rješenje. (c)


Metoda konjugiranih gradijenata (CG), κ(A)=100
10^5
10^0
10^-5
10^-10
10^-15
0
10
20
30
40
50
iteracija (k)
||b-A*x^(k)|| / ||b||
||e^(k)||_A
2((κ^1/2-1)/(κ^1/2+1))^k · ||e^(0)||_A

Rješenje. (d)



Metoda konjugiranih gradijenata (CG), κ(A)=100
10^5
10^0
10^-5
10^-10
10^-15
0
2
4
6
8
10
12
iteracija (k)
||b-A*x^(k)|| / ||b||
||e^(k)||_A
2((κ^1/2-1)/(κ^1/2+1))^k · ||e^(0)||_A

# GMRES

CG:

- simetrična, pozitivno definitna matrica sustava
- $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$
- $r^{(k)} = \min_{\substack{\pi \in \mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \left\| \pi(A) r^{(0)} \right\|_A$
- kratke rekurzivne formule za update $x^{(k)}$, $r^{(k)}$; ne treba baza za $\mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$

# GMRES

CG:

- simetrična, pozitivno definitna matrica sustava
- $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$
- $r^{(k)} = \min_{\substack{\pi \in \mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \left\| \pi(A) r^{(0)} \right\|_A$
- kratke rekurzivne formule za update $x^{(k)}$, $r^{(k)}$; ne treba baza za $\mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$

GMRES (Generalized Minimal RESidual):

- proizvoljna (regularna) matrica sustava
- $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$
- $r^{(k)} = \min_{\substack{\pi \in \mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \left\| \pi(A) r^{(0)} \right\|_2$
- složeniji izračun $x^{(k)}$; treba baza za $\mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$

# GMRES

$[r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2 r^{(0)}, \ldots, A^{k-1} r^{(0)}]$ je loša baza za $\mathcal{K}_k(r^{(0)}, A)$.

# GMRES

$[r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2 r^{(0)}, \ldots, A^{k-1} r^{(0)}]$ je loša baza za $\mathcal{K}_k(r^{(0)}, A)$.

Ortonormirana baza je numerički stabilna:

- gradimo redom o-n baze za $\mathcal{K}_1 \leqslant \mathcal{K}_2 \leqslant \mathcal{K}_3 \ldots$
- pretp. da smo dosad sagradili $V^{(k)} = [v_1 \; v_2 \; \ldots \; v_k]$ – o-n bazu za $\mathcal{K}_k$ t.d. je $\mathcal{K}_j = \mathrm{span}\{v_1, \ldots, v_j\}$, za sve $j \leq k$.

# GMRES

$[r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2 r^{(0)}, \ldots, A^{k-1} r^{(0)}]$ je loša baza za $\mathcal{K}_k(r^{(0)}, A)$.

Ortonormirana baza je numerički stabilna:

- gradimo redom o-n baze za $\mathcal{K}_1 \leqslant \mathcal{K}_2 \leqslant \mathcal{K}_3 \ldots$
- pretp. da smo dosad sagradili $V^{(k)} = [v_1 \ v_2 \ \ldots \ v_k]$ – o-n bazu za $\mathcal{K}_k$ t.d. je $\mathcal{K}_j = \mathrm{span}\{v_1, \ldots, v_j\}$, za sve $j \leq k$.
- može se pokazati da je $\mathcal{K}_{k+1} = \mathrm{span}\{V^{(k)}, Av_k\}$.

# GMRES

$[r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2 r^{(0)}, \ldots, A^{k-1} r^{(0)}]$ je loša baza za $\mathcal{K}_k(r^{(0)}, A)$.

Ortonormirana baza je numerički stabilna:

- gradimo redom o-n baze za $\mathcal{K}_1 \leqslant \mathcal{K}_2 \leqslant \mathcal{K}_3 \ldots$
- pretp. da smo dosad sagradili $V^{(k)} = [v_1 \; v_2 \; \ldots \; v_k]$ – o-n bazu za $\mathcal{K}_k$ t.d. je $\mathcal{K}_j = \mathrm{span}\{v_1, \ldots, v_j\}$, za sve $j \leq k$.
- može se pokazati da je $\mathcal{K}_{k+1} = \mathrm{span}\{V^{(k)}, Av_k\}$.
- Gram-Schmidtovim algoritmom ortogonaliziramo $Av_k$ na $V^{(k)}$:

$$h_{k+1,k} v_{k+1} = Av_k - h_{1,k} v_1 - h_{2,k} v_2 - \ldots - h_{k,k} v_k.$$

# GMRES

$[r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2 r^{(0)}, \ldots, A^{k-1} r^{(0)}]$ je loša baza za $\mathcal{K}_k(r^{(0)}, A)$.

Ortonormirana baza je numerički stabilna:

- gradimo redom o-n baze za $\mathcal{K}_1 \leqslant \mathcal{K}_2 \leqslant \mathcal{K}_3 \ldots$
- pretp. da smo dosad sagradili $V^{(k)} = [v_1 \ v_2 \ \ldots \ v_k]$ – o-n bazu za $\mathcal{K}_k$ t.d. je $\mathcal{K}_j = \mathrm{span}\{v_1, \ldots, v_j\}$, za sve $j \leq k$.
- može se pokazati da je $\mathcal{K}_{k+1} = \mathrm{span}\{V^{(k)}, Av_k\}$.
- Gram-Schmidtovim algoritmom ortogonaliziramo $Av_k$ na $V^{(k)}$:

$$h_{k+1,k} v_{k+1} = Av_k - h_{1,k} v_1 - h_{2,k} v_2 - \ldots - h_{k,k} v_k.$$

- stavimo $V^{(k+1)} = [V^{(k)} \ v_{k+1}]$.

Definiramo ovu gornje-Hessenbergovu matricu (reda $(k+1) \times k$):

$$H^{(k+1)} = \begin{bmatrix} h_{1,1} & h_{1,2} & h_{1,3} & h_{1,4} & \dots & h_{1,k-1} & h_{1,k} \\ h_{2,1} & h_{2,2} & h_{2,3} & h_{2,4} & \dots & h_{2,k-1} & h_{2,k} \\ & h_{3,2} & h_{3,3} & h_{3,4} & \dots & h_{3,k-1} & h_{3,k} \\ & & h_{4,3} & h_{4,4} & \dots & h_{4,k-1} & h_{4,k} \\ & & & & \vdots & & \\ & & & & & h_{k,k-1} & h_{k,k} \\ & & & & & & h_{k+1,k} \end{bmatrix}$$

Tada: $AV^{(k)} = V^{(k+1)}H^{(k+1)}$, tj.

$$A[v_1 \ v_2 \ \dots \ v_k] = [v_1 \ v_2 \ \dots \ v_k \ v_{k+1}]H^{(k+1)}$$

$j$-ti stupac: $Av_j$ je linearna kombinacija $v_1, v_2, \dots, v_j$.

**Algoritam (Arnoldijev algoritam – ortonormirana baza za $\mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$)**

$v_1 = r^{(0)} / \left\|r^{(0)}\right\|$;
**for** $k = 1, 2, \ldots$
  $z = Av_k$;
  **for** $j = 1, 2, \ldots, k$
    $h_{j,k} = v_j^\top z$;
    $z = z - h_{j,k} v_j$;
  **end**
  $h_{k+1,k} = \|z\|$;
  **if** $(h_{k+1,k} == 0)$
    **break**; // u tom slučaju je $\mathcal{K}_{k+1}(A, r^{(0)}) = \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$
  $v_{k+1} = z / h_{k+1,k}$;
**end**

# GMRES

Kada imamo bazu za $\mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$:

- biramo $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$, tj. $x^{(k)} = x^{(0)} + V^{(k)}y$, za neko $y \in \mathbb{R}^k$.
- cilj: $\left\|r^{(k)}\right\| \longrightarrow \min.$

# GMRES

Kada imamo bazu za $\mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$:

- biramo $x^{(k)} \in x^{(0)} + \mathcal{K}_k(A, r^{(0)})$, tj. $x^{(k)} = x^{(0)} + V^{(k)} y$, za neko $y \in \mathbb{R}^k$.
- cilj: $\left\| r^{(k)} \right\| \longrightarrow \min.$

$$
\begin{aligned}
\left\| r^{(k)} \right\| &= \left\| b - Ax^{(k)} \right\| = \left\| b - A(x^{(0)} + V^{(k)} y) \right\| \\
&= \left\| r^{(0)} - AV^{(k)} y \right\| = \left\| r^{(0)} - V^{(k+1)} H^{(k+1)} y \right\| \\
&= \left\| \left\| r^{(0)} \right\| \cdot V^{(k+1)} e_1 - V^{(k+1)} H^{(k+1)} y \right\| \\
&= \left\| V^{(k+1)} ( \left\| r^{(0)} \right\| e_1 - H^{(k+1)} y) \right\| \\
&= \left\| \left\| r^{(0)} \right\| e_1 - H^{(k+1)} y \right\| = \min_y \left\| \left\| r^{(0)} \right\| e_1 - H^{(k+1)} y \right\|
\end{aligned}
$$

# GMRES

**Algoritam (GMRES)**

$\beta = \left\| r^{(0)} \right\|$;
**for** $k = 1, 2, \ldots$
  *Izračunaj* $V^{(k+1)}$ *i* $H^{(k+1)}$ *(jedan korak Arnoldijevog algoritma);*
  *Riješi problem najmanjih kvadrata* $\min_y \left\| \beta e_1 - H^{(k+1)} y \right\|$;
  $x^{(k)} = x^{(0)} + V^{(k)} y$;
  **if** *(*$x^{(k)}$ *dovoljno dobar)*
    **break**;
**end**

# GMRES

**Algoritam (GMRES)**

$\beta = \left\| r^{(0)} \right\|$;
**for** $k = 1, 2, \ldots$
  *Izračunaj* $V^{(k+1)}$ *i* $H^{(k+1)}$ *(jedan korak Arnoldijevog algoritma);*
  *Riješi problem najmanjih kvadrata* $\min_y \left\| \beta e_1 - H^{(k+1)} y \right\|$;
  $x^{(k)} = x^{(0)} + V^{(k)} y$;
  **if** ($x^{(k)}$ *dovoljno dobar)*
    **break**;
**end**

- problem najmanjih kvadrata sa Hessenbergovog matricom se može riješiti puno efikasnije nego s proizvoljnom;
- moguće je i bez rješavanja problema najmanjih kvadrata izračunati $\left\| r^{(k)} \right\|$, pa $x^{(k)}$ računamo tek kad je $r^{(k)}$ dovoljno malen.

# GMRES – konvergencija

Pretp. $A$ dijagonalizabilna, tj. $A = X\Lambda X^{-1}$.

$$
\begin{aligned}
\left\|r^{(k)}\right\| &= \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \left\|\pi(A)r^{(0)}\right\| \\
&= \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \left\|X\pi(\Lambda)X^{-1}r^{(0)}\right\| \\
&\leq \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \|X\| \cdot \|\pi(\Lambda)\| \cdot \left\|X^{-1}\right\| \cdot \left\|r^{(0)}\right\| \\
&= \kappa_2(X) \cdot \left\|r^{(0)}\right\| \cdot \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \|\pi(\Lambda)\| \\
&= \kappa_2(X) \cdot \left\|r^{(0)}\right\| \cdot \min_{\substack{\pi\in\mathcal{P}_k \\ \pi(0)=1}} \max_{\lambda\in\Lambda(A)} |\pi(\lambda)|.
\end{aligned}
$$

$\Lambda \subseteq \mathbb{C}$, optimalan $\pi$ je teško pronaći/ocijeniti.

# GMRES – konvergencija

**Teorem (Greenbaum, Pták, Strakoš)**

*Neka je zadan niz $a_0 \geq a_1 \geq \ldots \geq a_{n-1} > 0$, te neka su $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ proizvoljni kompleksni brojevi. Tada postoji matrica $A$ čije su svojstvene vrijednosti $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$, te vektor $b$ takvi da reziduali GMRES metode za sustav $Ax = b$ zadovoljavaju*

$$\left\| r^{(k)} \right\| = a_k,$$

*za sve $k = 0, 1, \ldots, n-1$.*

# Zadatak 9

Napišite funkciju `x=GMRES(A,b,x0)` koja GMRES-metodom računa aproksimaciju rješenja linearnog sustava $Ax = b$, uz početnu iteraciju `x0`. Iteracije zaustavite kada bude $\left\|r^{(k)}\right\| / \left\|r^{(0)}\right\| < 10^{-8}$.

Neka je $a_k = (12 - k/10)^2$, za $k = 0, 1, \ldots, 99$. Pronađite matricu $A$ reda $100$ i vektor $b$ takve da reziduali GMRES metode za sustav $Ax = b$ zadovoljavaju $\left\|r^{(k)}\right\| = a_k$. Testirajte funkciju `GMRES` na ovom sustavu.

# Zadatak 9

Rješenje. Stavimo npr. $\lambda_j = \cos\frac{2\pi j}{100} + i\sin\frac{2\pi j}{100}$, $j = 1, \ldots, 100$.

# Zadatak 9

Rješenje. Stavimo npr. $\lambda_j = \cos\frac{2\pi j}{100} + i\sin\frac{2\pi j}{100}, j = 1, \ldots, 100.$

Definiramo:

- $g_k = \sqrt{a_{k-1}^2 - a_k^2}, k = 1, 2, \ldots, 100$; ($a_{100} = 0$);

# Zadatak 9

Rješenje. Stavimo npr. $\lambda_j = \cos\frac{2\pi j}{100} + i\sin\frac{2\pi j}{100}$, $j = 1, \dots, 100$.

Definiramo:

- $g_k = \sqrt{a_{k-1}^2 - a_k^2}$, $k = 1, 2, \dots, 100$; ($a_{100} = 0$);
- $Q = [q_1 \; q_2 \; \dots, q_{100}]$ slučajna ortogonalna matrica;

# Zadatak 9

Rješenje. Stavimo npr. $\lambda_j = \cos \frac{2\pi j}{100} + i \sin \frac{2\pi j}{100}$, $j = 1, \ldots, 100$.

Definiramo:

- $g_k = \sqrt{a_{k-1}^2 - a_k^2}$, $k = 1, 2, \ldots, 100$; $(a_{100} = 0)$;
- $Q = [q_1 \ q_2 \ \ldots, q_{100}]$ slučajna ortogonalna matrica;
- $b = g_1 q_1 + g_2 q_2 + \ldots + g_{100} q_{100}$;

# Zadatak 9

Rješenje. Stavimo npr. $\lambda_j = \cos\frac{2\pi j}{100} + i\sin\frac{2\pi j}{100}$, $j = 1, \ldots, 100$.

Definiramo:

- $g_k = \sqrt{a_{k-1}^2 - a_k^2}$, $k = 1, 2, \ldots, 100$; ($a_{100} = 0$);
- $Q = [q_1\ q_2\ \ \ldots, q_{100}]$ slučajna ortogonalna matrica;
- $b = g_1 q_1 + g_2 q_2 + \ldots + g_{100} q_{100}$;
- $B = [b\ q_1\ \ \ldots\ \ q_{99}]$;

# Zadatak 9

Rješenje. Stavimo npr. $\lambda_j = \cos \frac{2\pi j}{100} + i \sin \frac{2\pi j}{100}$, $j = 1, \ldots, 100$.

Definiramo:

- $g_k = \sqrt{a_{k-1}^2 - a_k^2}$, $k = 1, 2, \ldots, 100$; ($a_{100} = 0$);
- $Q = [q_1 \; q_2 \; \ldots, q_{100}]$ slučajna ortogonalna matrica;
- $b = g_1 q_1 + g_2 q_2 + \ldots + g_{100} q_{100}$;
- $B = [b \; q_1 \; \ldots \; q_{99}]$;
- $p(z) = z^{100} - \sum_{j=0}^{99} \alpha_j z^j = (z - \lambda_1)(z - \lambda_2) \ldots (z - \lambda_n) = z^{100} - 1$;

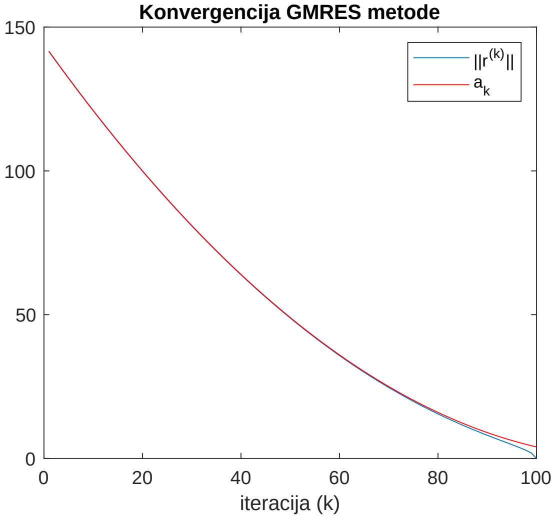
# Zadatak 9

Rješenje. Stavimo npr. $\lambda_j = \cos\frac{2\pi j}{100} + i\sin\frac{2\pi j}{100}$, $j = 1, \ldots, 100$.

Definiramo:

- $g_k = \sqrt{a_{k-1}^2 - a_k^2}$, $k = 1, 2, \ldots, 100$; $(a_{100} = 0)$;
- $Q = [q_1\ q_2\ \ldots, q_{100}]$ slučajna ortogonalna matrica;
- $b = g_1 q_1 + g_2 q_2 + \ldots + g_{100} q_{100}$;
- $B = [b\ q_1\ \ldots\ q_{99}]$;
- $p(z) = z^{100} - \sum_{j=0}^{99} \alpha_j z^j = (z-\lambda_1)(z-\lambda_2)\ldots(z-\lambda_n) = z^{100} - 1$;
- $A = B \cdot \begin{bmatrix} 0 & \ldots & 0 & \alpha_0 \\ 1 & \ldots & 0 & \alpha_1 \\ & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & 1 & \alpha_{99} \end{bmatrix} \cdot B^{-1}$

Rješenje.


Konvergencija GMRES metode
150
100
50
0
0
20
40
60
80
100
iteracija (k)
||r^(k)||
a_k

# PREKONDICIONIRANJE

# Prekondicioniranje

Prekondicioniranje – modifikacija početnog sustava $Ax = b$ koja ubrzava metodu za rješavanje sustava.

# Prekondicioniranje

Prekondicioniranje – modifikacija početnog sustava $Ax = b$ koja ubrzava metodu za rješavanje sustava.

Umjesto $Ax = b$, rješavamo $M^{-1}Ax = M^{-1}b$.
Kada iterativna metoda treba izračunati $z = M^{-1}Av$, to radimo ovako:

(1) $t = Av$;

(2) Riješi sustav $Mz = t$.

# Prekondicioniranje

Prekondicioniranje – modifikacija početnog sustava $Ax = b$ koja ubrzava metodu za rješavanje sustava.

Umjesto $Ax = b$, rješavamo $M^{-1}Ax = M^{-1}b$.
Kada iterativna metoda treba izračunati $z = M^{-1}Av$, to radimo ovako:

(1) $t = Av$;

(2) Riješi sustav $Mz = t$.

Cilj – odabrati $M$ tako da:

- $M \approx A$ u nekom smislu ($M^{-1}A \approx I$).
- Sustavi tipa $Mz = t$ se mogu jako brzo riješiti.
- CG, GMRES – npr. $\kappa(M^{-1}A) \ll \kappa(A)$ ili $\Lambda(M^{-1}A)$ koncentriran oko jedne točke.

# Prekondicioniranje dijagonalnom matricom

$M$ = dijagonala matrice $A$.

Ako je $A$ pozitivno definitna, onda možemo rješavati i

$$Ax = b \Rightarrow DADy = Db, \; x = Dy,$$

gdje je $D$ matrica iz ovog Teorema:

**Teorem (Van der Sluis)**

*Neka je $A$ pozitivno definitna matrica i $D = diag(\sqrt{1/A_{1,1}}, \sqrt{1/A_{2,2}}, \ldots, \sqrt{1/A_{n,n}})$. Tada:*

$$\kappa(DAD) \leq n \cdot \min_{\Delta \in \mathcal{D}} \kappa(\Delta A \Delta),$$

*gdje je $\mathcal{D}$ skup svih dijagonalnih matrica sa pozitivnim elementima dijagonale.*

# Prekondicioniranje simetričnih matrica

Ako $A$ simetrična, onda $M^{-1}A$ ne mora biti simetrična.

Ali, ako $M = LL^{\mathsf{T}}$, onda

$$\begin{aligned} M^{-1}Ax &= M^{-1}b \\ L^{-\mathsf{T}}L^{-1}Ax &= L^{-\mathsf{T}}L^{-1}b \\ L^{-1}AL^{-\mathsf{T}}y &= L^{-1}b, \end{aligned}$$

uz $x = L^{-\mathsf{T}}y$. Sada je matrica sustava $L^{-1}AL^{-\mathsf{T}}$ simetrična.

Uoči: matrice $M^{-1}A$ i $L^{-1}AL^{-\mathsf{T}}$ su slične, pa su očuvana svojstva konvergencije koja ovise o spektru matrice sustava.

# Prekondicioniranje pozitivno definitnih matrica

Kako dobiti $M = LL^{\mathsf{T}}$?
Ako $A$ pozitivno definitna – npr. incomplete Cholesky.
MATLAB: `R=cholinc(A,'0'); L=R';`

**Algoritam (incomplete Cholesky)**

**for** $i = 1, 2, \ldots, n$
  $L_{i,i} = \sqrt{A_{i,i} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{i,k}^2}$
  **for** $j = i+1, \ldots, n$
    **if** $(A_{i,j} \neq 0)$
      $L_{j,i} = (A_{i,j} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{i,k} L_{j,k}) / L_{i,i}$
    **else**
      $L_{j,i} = 0$
  **end**
**end**

Uoči: struktura nula u matrici $L$ je ista kao struktura nula u (donjem trokutu od) $A$!

# Prekondicioniranje u CG

Ponekad $M$ je pozitivno definitna, ali nije zadana u formi $M = LL^\top$. Želimo verziju CG za sustav $L^{-1}AL^{-\top}y = L^{-1}b$ koja ne koristi $L$ već samo $M$.

# Prekondicioniranje u CG

Ponekad $M$ je pozitivno definitna, ali nije zadana u formi $M = LL^\mathsf{T}$. Želimo verziju CG za sustav $L^{-1}AL^{-\mathsf{T}}y = L^{-1}b$ koja ne koristi $L$ već samo $M$.

Neka CG za $L^{-1}AL^{-\mathsf{T}}\tilde{x} = L^{-1}b$ koristi $\tilde{x}^{(k)}$, $\tilde{r}^{(k)}$, $\tilde{d}_k$, $\alpha_k, \beta_k$.

Uvedimo oznake:

$$
\begin{aligned}
x^{(k)} &= L^{-\mathsf{T}}\tilde{x}^{(k)}, \\
r^{(k)} &= L\tilde{r}^{(k)}, \\
d_k &= L^{-\mathsf{T}}\tilde{d}_k.
\end{aligned}
$$

## Prekondicioniranje u CG

Tada:

$$
\begin{aligned}
x^{(k+1)} &= L^{-\mathsf{T}}\tilde{x}^{(k+1)} = L^{-\mathsf{T}}(\tilde{x}^{(k)} + \alpha_k \tilde{d}_k) = x^{(k)} + \alpha_k d_k \\
r^{(k+1)} &= L\tilde{r}^{(k+1)} = L(\tilde{r}^{(k)} - \alpha_k L^{-1}AL^{-\mathsf{T}}\tilde{d}_k) = r^{(k)} - \alpha_k A d_k \\
d_{k+1} &= L^{-\mathsf{T}}\tilde{d}_{k+1} = L^{-\mathsf{T}}(\tilde{r}^{(k+1)} - \beta_k \tilde{d}_k) = L^{-\mathsf{T}}L^{-1}r^{(k+1)} - \beta_k d_k \\
&= M^{-1}r^{(k+1)} - \beta_k d_k \\
\alpha_k &= \frac{(\tilde{r}^{(k)})^{\mathsf{T}}\tilde{r}^{(k)}}{\tilde{d}_k^{\mathsf{T}}(L^{-1}AL^{-\mathsf{T}})\tilde{d}_k} = \frac{(r^{(k)})^{\mathsf{T}}L^{-\mathsf{T}}L^{-1}r^{(k)}}{d_k^{\mathsf{T}}Ad_k} = \frac{(r^{(k)})^{\mathsf{T}}M^{-1}r^{(k)}}{d_k^{\mathsf{T}}Ad_k} \\
\beta_k &= \frac{-(\tilde{r}^{(k+1)})^{\mathsf{T}}\tilde{r}^{(k+1)}}{(\tilde{r}^{(k)})^{\mathsf{T}}\tilde{r}^{(k)}} = \frac{-(r^{(k+1)})^{\mathsf{T}}M^{-1}r^{(k+1)}}{(r^{(k)})^{\mathsf{T}}M^{-1}r^{(k)}}
\end{aligned}
$$

# Metoda konjugiranih gradijenata s prekondicioniranjem

**Algoritam (CG sa prekondicioniranjem: $A$, $M$ simetrične, poz. definitne)**

$x^{(0)}$ *zadan;*
$r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$;
*Riješi sustav* $Mp_0 = r^{(0)}$;
$d_0 = p_0$;
**for** $k = 0, 1, 2, \ldots$
  $\alpha_k = \frac{(r^{(k)})^\mathsf{T} p_k}{d_k^\mathsf{T} A d_k}$;
  $x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha_k d_k$;
  $r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha_k A d_k$;
  *Riješi sustav* $Mp_{k+1} = r^{(k+1)}$;
  $\beta_k = \frac{-(r^{(k+1)})^\mathsf{T} p_{k+1}}{(r^{(k)})^\mathsf{T} p_k}$;
  $d_{k+1} = p_{k+1} - \beta_k d_k$;
**end**

# Zadatak 10

Napišite funkciju `x=CG_precond(A,M,b,x0)` koja CG-metodom računa aproksimaciju rješenja linearnog sustava $Ax = b$, uz početnu iteraciju `x0` i matricu prekondicioniranja `M`. Iteracije zaustavite kada bude $\left\|b - Ax^{(k)}\right\| / \left\|b - Ax^{(0)}\right\| < 10^{-10}$.

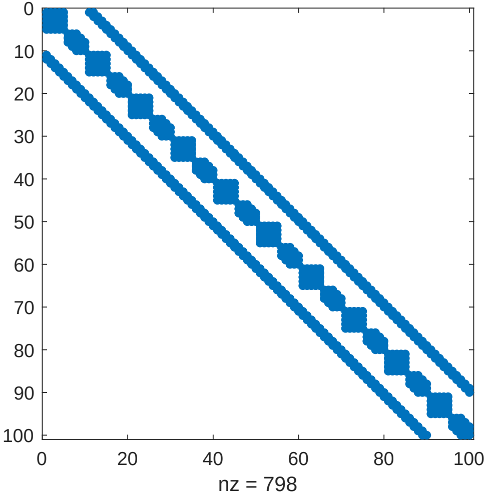
Testirajte brzinu konvergencije:

- bez prekondicioniranja,
- uz prekondicioniranje dijagonalnom matricom,
- uz prekondicioniranje incomplete Cholesky faktorizacijom,

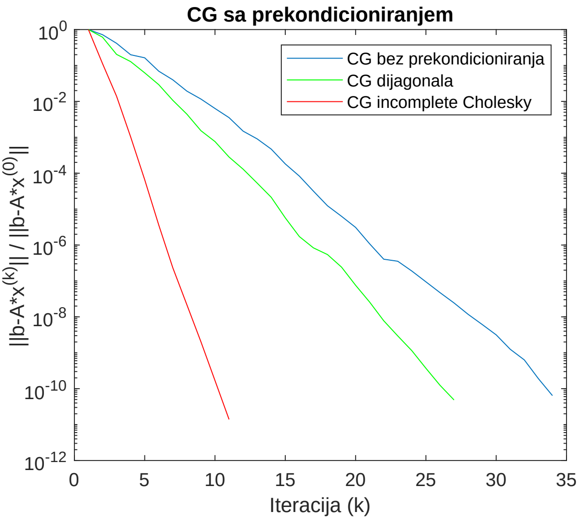
ako je matrica sustava $Ax = b$ Stieltjesova matrica iz datoteke `'stieltjes.mat'`. Neka je desna strana takva da je rješenje `x=[1 1 ... 1]'`.

## Zadatak 10

Rješenje. `spy(A);`



Rješenje.


CG sa prekondicioniranjem
CG bez prekondicioniranja
CG dijagonala
CG incomplete Cholesky
$10^{0}$
$10^{-2}$
$10^{-4}$
$10^{-6}$
$10^{-8}$
$10^{-10}$
$10^{-12}$
0
5
10
15
20
25
30
35
$||b-A*x^{(k)}|| / ||b-A*x^{(0)}||$
Iteracija (k)

# Zadatak 10

Rješenje.
Bez prekondicioniranja:

- $\kappa = 14.56273$
- Metoda konvergira u 33 iteracija.

Prekondicioniranje dijagonalnom matricom:

- $\kappa = 7.816230$
- Metoda konvergira u 26 iteracija.

Prekondicioniranje pomoću incomplete Cholesky faktorizacije:

- $\kappa = 1.502516$
- Metoda konvergira u 10 iteracija.