Iterativne metode za rješavanje linearnih sustava

Mecanović, Marija

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Marija Mecanović

Iterativne metode za rješavanje linearnih sustava

Završni rad

Osijek, 2017.

Sveučilište J. J. Strossmayera u Osijeku
Odjel za matematiku
Sveučilišni preddiplomski studij matematike

Marija Mecanović

Iterativne metode za rješavanje linearnih sustava

Završni rad

Mentor: doc. dr. sc. Ivana Kuzmanović

Osijek, 2017.

Sadržaj

Sažetak

Postoje dva pristupa rješavanju sustava linearnih jednadžbi $Ax = b$ gdje za zadanu matricu $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ i vektor $b \in \mathbb{R}^m$ treba odrediti vektor $x \in \mathbb{R}^n$.
U prvi spadaju takozvane direktne metode kod kojih se matrica A prikazuje kao produkt jednostavnijih matrica, najčešće trokutastih. To omogućava rješavanje jednostavnijih linearnih sustava, te dolazak do egzaktnog rješenja pri čemu je složenost, odnosno broj potrebnih aritmetičkih operacija za dolazak do egzaktnog rješenja $\mathcal{O}(n^3)$.
U drugi pristup spadaju iterativne metode koje u pravilu ne mogu izračunati u potpunosti točan rezultat u konačnom broju koraka, već su konstruirane tako da počinju s aproksimacijom rješenja i svakim svojim korakom smanjuju odstupanje, tj. udaljenost od točnog rješenja, odnosno pogrešku u aproksimaciji rješenja. Kod njih je pogreška u izračunu aproksimacije rješenja dovoljno mala već nakon znatno manje operacija od $\mathcal{O}(n^3)$. Dakle, one ne određuju rješenje direktno nego iterativno (postupno), a koriste se pri rješavanju velikih, rijetko popunjenih sustava linearnih jednadžbi. Takvim se metodama konstruira niz $x^{(k)}$, $k \in \mathbb{N}$ za koji vrijedi

$$x^{(k)} \to x \text{ za } k \to \infty.$$

Najčešće korištene iterativne metode su Jacobijeva, Gauss-Seidelova te metoda konjigiranih gradijenata.

Ključne riječi: linearni sustavi, iterativne metode, Jacobijeva metoda, Gauss-Seidelova metoda, metoda konjugiranih gradijenata

Abstract

There are two approaches to solve systems of linear equations $Ax = b$ where for the matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ and vector $b \in \mathbb{R}^m$ we have to determine vector $x \in \mathbb{R}^n$. The first are so-called direct methods in which the matrix A is presented as a product of simpler matrices, usually triangular. It allows us to solve simpler linear systems, and to come to the exact solution, where the complexity, or the number of required arithmetic operations for getting exact solution is $\mathcal{O}(n^3)$.
The second approach includes iterative methods that can not in generally calculate a completely accurate solution in the final number of steps, but are designed to begin with the approximation of the solution and with each step to reduce the deviation, ie. the distance from the exact solution, or the error in the approximation of the solution. The error in calculated approximation of the solution is small enough even after significantly less operations than $\mathcal{O}(n^3)$. Such methods do not obtain the solution directly, but iteratively (gradually), and they are usually used to solve big sparse systems of linear equations. With method like that, we construct sequence $x^{(k)}$, $k \in \mathbb{N}$ to which it applies

$$x^{(k)} \to x \text{ for } k \to \infty.$$

The most commonly used iterative methods are Jacobi method, Gauss-Seidel method, and the method of conjugated gradients.

Key words: linear systems, iterative methods, Jacobi method, Gauss-Seidel method, method of conjugated gradients

Uvod

Postavimo si vrlo jednostavan problem: riješiti sustav n linearnih jednadžbi sa n nepoznanica oblika $Ax = b$, pri čemu je A kvadratna, regularna matrica dimenzije $n \times n$, a b je n-dimenzionalni vektor. Čini se kao vrlo jednostavan problem za riješiti, naročito za maleni broj jednadžbi i nepoznanica. Međutim, ovaj problem ipak krije mnoge zamke, pa čak i danas kada su nam na raspolaganju vrlo moćna računala. Zbog toga su se s vremenom razvile mnoge različite metode za rješavanje sustava $Ax = b$, a u ovom radu specijalno ćemo se osvrnuti na grupu metoda koje nazivamo iterativnim metodama. Također će biti prikazana i njihova učinkovita implementacija u programskom jeziku MATLAB.
U prvom poglavlju ovog završnog rada bit će uvedene iterativne metode u svom idejnom smislu, stacionarne i nestacionarne, te će posebno biti objašnjene Jacobijeva i Gauss-Seidelova metoda kao predstavnice stacionarnih iterativnih metoda, a zatim će u trećem potpoglavlju prvog poglavlja biti objašnjena nestacionarna iterativna metoda konjugiranih gradijenata.
U drugom poglavlju bit će predstavljena implementacija navedenih iterativnih metoda u programskom jeziku MATLAB. Velik broj znanstvenika i inženjera diljem svijeta koriste MATLAB za analizu i dizajniranje sustava i proizvoda mijenjajući naš svijet. Njegova platforma je optimizirana za rješavanje velikog broja znanstvenih i tehničkih problema, te je njegov programski jezik, koji je matrično orijentiran, najprirodniji način izražavanja računalne matematike. Ugrađena grafika olakšava vizualizaciju i dobivanje uvida iz podataka. Upravo iz tog razloga, MATLAB je pogodan alat za implementaciju i testiranje navedenih iterativnih metoda.
U trećem poglavlju će na primjerima biti uspoređene brzine konvergencije navedenih iterativnih metoda za nekoliko klasa problema.

1 Iterativne metode

Umjesto direktnih metoda za rješavanje linearnih sustava koje zahtjevaju velik broj aritmetičkih operacija za izračun rješenja, u praksi se vrlo često koriste iterativne metode jer su puno učinkovitije, osobito za velike rijetko popunjene sustave (engl. *sparse*), tj. sustave koji imaju vrlo velik broj elemenata jednakih nuli.
Iterativne metode mogu se podijeliti u dvije osnovne skupine: stacionarne iterativne metode i nestacionarne iterativne metode. Stacionarne iterativne metode su starije i jednostavnije za razumijevanje, ali su obično manje učinkovite od nestacionarnih iterativnih metoda. U skupinu stacionarnih metoda spadaju sljedeće metode: Jacobijeva metoda, Gauss-Seidelova metoda, SOR metoda, itd.
Nestacionarne iterativne metode su razvijene relativno nedavno. Njihova analiza je obično teža za razumijevanje, pa su time i teže za implementaciju, no njihova učinkovitost može biti izuzetno velika. Ova skupina metoda razlikuje se od stacionarnih metoda po tome što njihovi izračuni uključuju informacije koje se mijenjaju sa svakim korakom iteracije. Tipično je da se konstante izračunavaju skalarnim umnošcima vektora ostataka i drugih vektora koji nastaju samom iterativnom metodom. U tu skupinu spadaju sljedeće metode: metoda konjugiranih gradijenta (engl. *Conjugate Gradient Method*), metoda minimalnog ostatka (engl. *Minimum Residual Method*), metoda konjugiranih gradijenta na normalnim jednadžbama (engl. *Conjugate Gradient on the Normal Equations Method*), metoda dvostrukog konjugiranog gradijenta (engl. *BiConjugate Gradient Method*), metoda kvadratnog konjugiranog gradijenta (engl. *Conjugate Gradient Squared Method*), Chebyshevljeva iteracija (engl. *Chebyshev Iteration*).

Pogledajmo prvo ideju nastanka stacionarnih iterativnih metoda.
Neka je dana matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i neka su $M,N \in \mathbb{R}^{n\times n}$ takve da je

$$A = M + N \tag{1.1}$$

pri čemu je matrica M izabrana tako da se njen inverz računa lakše od inverza matrice A. Tada dani sustav $Ax = b$ možemo zapisati u obliku

$$Mx = -Nx + b$$

pri čemu je M regularna matrica. Ako nam je dana aproksimacija $x^{(k)}$, tada možemo izračunati $x^{(k+1)}$ aproksimaciju rješenja kao rješenje jednadžbe

$$Mx^{(k+1)} = b - Nx^{(k)} \qquad k = 0, 1, 2, ... \tag{1.2}$$

Pretpostavimo li da vrijedi $\lim\limits_{k\to\infty} x^{(k+1)} = x$, tada za limes x vrijedi

$$Mx = \lim_{k\to\infty} Mx^{(k+1)} = \lim_{k\to\infty} (b - Nx^{(k)}) = b - Nx.$$

Lako se uoči da za taj limes vrijedi $Ax = b$. To nam pokazuje da u slučaju konvergencije niza (1.2) njegov limes predstavlja rješenje sustava linearnih jednadžbi.
U svrhu proučavanja konvergencije iterativne metode, proučavamo ponašanje pogreške $e^{(k+1)} = x^{(k+1)} - x$ gdje je x točno, odnosno egzaktno rješenje sustava linearnih jednadžbi.
Tada slijedi:

$$Me^{(k+1)} = Mx^{(k+1)} - Mx = (b - Nx^{(k)}) - (A - N)x = -Ne^{(k)},$$

odnosno $e^{(k+1)} = -M^{-1}Ne^{(k)}$, za sve $k \in \mathbb{N}$. Prema tome, promatrana iterativna metoda će konvergirati ako i samo ako $e^{(k+1)} \to 0$ za $k+1 \to \infty$, tj. $e^{(k)} \to 0$ za $k \to \infty$. Sljedeći teorem karakterizira konvergenciju iterativne metode pomoću svojstava spektralnog radijusa matrice

$$C = -M^{-1}N \tag{1.3}$$

pa ćemo se u svrhu toga prisjetiti definicije spektralnog radijusa matrice.

Definicija 1.1 *Spektralni radijus matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ definiramo sa*

$$\rho(A) = \max\{|\lambda| : \lambda \text{ svojstvena vrijednost matrice } A\}.$$

Teorem 1.1 *Neka je dana matrica $C \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i vektori $e^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ i $e^{(k)} = C^k e^{(0)} \in \mathbb{R}^n$, za sve $k \in \mathbb{N}$. Tada $e^{(k)} \to 0$ za svaki $e^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ ako i samo ako je $\rho(C) < 1$.*

Dokaz. Pretpostavimo da je $\rho(C) < 1$. Tada možemo pronaći induciranu matričnu normu takvu da je $||C|| < 1$ pa imamo

$$||e^{(k)}|| = ||C^k e^{(0)}|| \leq ||C||^k ||e^{(0)}|| \to 0$$

za $k \to \infty$. (Vidi [6].)
No međutim, ako je $\rho(C) \geq 1$, tada postoji barem jedan $e^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ za koji vrijedi da je $Ce^{(0)} = \lambda e^{(0)}$ za neki $\lambda \in \mathbb{R}$ takav da je $|\lambda| \geq 1$. Za taj vektor $e^{(0)}$ dobivamo

$$||e^{(k)}|| = ||C^k e^{(0)}|| = |\lambda|^k ||e^{(0)}||$$

iz čega se vidi da $e^{(k)}$ ne konvergira ka 0 za $k \to \infty$. □

Napomena 1.1 *Posljedica gornjeg teorema je ocjena konvergencije iterativnog postupka (1.2). Postupak će konvergirati ako i samo ako je $\rho(C) < 1$. Brzina konvergencije je veća što je $\rho(C)$ manji, stoga slijedi ocjena:*

$$||x^{(k+1)} - x^{(k)}|| \leq \rho(C)||x^{(k)} - x|| \tag{1.4}$$

gdje je $||\cdot||$ bilo koja vektorska norma.

Nakon što smo u prethodnom teoremu naveli uvjete konvergencije stacionarnih iterativnih metoda, u sljedeća dva potpoglavlja bit će dan detaljniji pregled dvije osnovne stacionarne metode, te će u trećem potpoglavlju biti objašnjena najčešće korištena nestacionarna metoda. No prije nego krenemo na detaljnu obradu stacionarnih metoda, objasnimo prvo idejnu strukturu nestacionarnih metoda.

Nestacionarne iterativne metode se uvelike razlikuju od prethodno predstavljenih stacionarnih iterativnih metoda. One zahtjevaju jače uvjete na matricu sustava, odnosno matrica A treba biti simetrična, pozitivno definitna matrica. U svrhu lakšeg shvaćanja ovih metoda, podsjetimo se prvo definicije transponirane, simetrične, pozitivno definitne i ortogonalne matrice.

Definicija 1.2 ***Transponirana matrica*** *matrice $A = (a_{ij})$ s m redaka i n stupaca je matrica $B = (b_{ji})$ koja ima n redaka i m stupaca, te za koju je $b_{ji} = a_{ij}$, pri čemu je $1 \leq i \leq m$, $1 \leq j \leq n$.*
Transponiranu matricu matrice A označavamo s A^T.

Definicija 1.3 *Matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je* ***simetrična*** *ako je jednaka svojoj transponiranoj matrici, $A = A^T$, tj. $a_{ij} = a_{ji}$, $\forall i, j$ za koje vrijedi $1 \le i, j \le n$.*

Definicija 1.4 *Simetrična matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je* ***pozitivno definitna*** *ako za svaki vektor $x \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ vrijedi da je $x^T Ax > 0$.*
Također, simetrična matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je pozitivno definitna ako i samo ako su sve svojstvene vrijednosti od A strogo veće od 0. (Za dokaz vidjeti [3].)

Definicija 1.5 *Kvadratna matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ za koju vrijedi $A^T A = AA^T = I$, pri čemu je I jedinična matrica, a A^T transponirana matrica matrici A zove se* ***ortogonalna matrica****.*

Uvedimo prvo ideju nastanka nestacionarnih iterativnih metoda. Osnovna teza od koje kreću nestacionarne iterativne metode je tvrdnja iz linearne algebre koja kaže da svaka matrica poništava svoj karakteristični i minimalni polinom. Ako je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i $b \in \mathbb{R}^n$ imamo:

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

pri čemu je $\kappa_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \sum_{i=0}^{n} a_i \lambda^i$ karakteristični polinom matrice A. Ukoliko zahtjevamo da je matrica A regularna kako bismo osigurali jedinstvenost rješenja, nula ne može biti korijen karakterističnog polinoma, stoga vrijedi da je $a_0 \neq 0$. Iz te relacije lako dobivamo:

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

iz čega vrlo jednostavno dobivamo da je:

$$A^{-1} = -\frac{1}{a_0}(a_1 I + \ldots + a_{n-1}A^{n-2} + a_n A^{n-1}). \tag{1.5}$$

Rješavanjem linearnog sustava $Ax = b$, dobivamo da za vektor rješenja vrijedi $x = A^{-1}b$, pa uzvrštavanjem izraza (1.5) slijedi da je

$$x = -\frac{a_1}{a_0}b - \ldots - \frac{a_{n-1}}{a_0}A^{n-2}b - \frac{a_n}{a_0}A^{n-1}b,$$

stoga zaključujemo da

$$x \in \operatorname{span}\{b, Ab, \ldots, A^{n-1}b\} = \mathcal{K}_n(A, b). \tag{1.6}$$

Prostor na desnoj strani nazivamo Krylovljevim potprostorom matrice A i početnog vektora b. Iz relacije (1.6) proizlazi ideja za razvijanjem iterativnih metoda za rješavanje linearnih sustava koje se temelje na aproksimacijama iz Krylovljevih potprostora. S obzirom da je vektor b izravno vezan za problem rješavanja sustava $Ax = b$, prirodno nam se nameće za prvu aproksimaciju rješenja uzeti "višekratnik" od b, odnosno

$$x^{(0)} \in \operatorname{span}\{b\}.$$

Sljedeći korak je izračunavanje produkta Ab, pri čemu zahtjevamo da nam je sljedeća aproksimacija jednaka linearnoj kombinaciji vektora b i Ab, pa slijedi

$$x^{(1)} \in \operatorname{span}\{b, Ab\}.$$

Zaključujemo da će aproksimacija u k-tom koraku zadovoljavati

$$x^{(k)} \in \text{span}\{b, Ab, \ldots, A^{k-1}b\}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Pogledajmo prije svega iterativni postupak. Ako pretpostavimo da je $x^{(k)}$ aproksimacija u k-tom koraku iterativne metode, te ako uzmemo da je $x^{(k+1)} = x^{(k)} + A^{-1}(b - Ax^{(k)})$, tada je $x^{(k+1)} = A^{-1}b$ rješenje sustava $Ax = b$, za sve $k = 0, 1, 2, \ldots$.
Korekciju vektora $x^{(k)}$ učinit ćemo pomoću neke njegove aproksimacije, od koje zahtjevamo da se lakše izračunava i da nas drži unutar Krylovljevih potprostora. U tu shvrhu pretpostavimo da polazimo od iteracije jednostavnog oblika

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)}(b - Ax^{(k)}), \tag{1.7}$$

gdje je $\alpha^{(k)}$ parametar koji određuje točku na pravcu koji prolazi kroz točku $x^{(k)}$ i pruža se u smjeru vektora $b - Ax^{(k)}$. Iz (1.7) stoga slijedi

$$\begin{aligned} x^{(k)} &\in x^{(0)} + \text{span}\{r^{(0)}, Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \ldots, A^{k-1}r^{(0)}\}, \\ r^{(k)} &\in r^{(0)} + \text{span}\{Ar^{(0)}, A^2r^{(0)}, \ldots, A^k r^{(0)}\} \end{aligned} \tag{1.8}$$

pri čemu je $r^{(k)} = b - Ax^{(k)}$ rezidual k-te iteracije, a sa $e^{(k)} = A^{-1}r^{(k)} = A^{-1}b - x^{(k)}$ označavamo pogrešku u k-toj iteraciji. Općenito, iteracija nestacionarne iterativne metode će biti oblika

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + z^{(k-1)} \tag{1.9}$$

pri čemu k-ta aproksimacija mora zadovoljavati (1.8).

Sada slijedi detaljan pregled Jacobijeve i Gauss-Seidelove metode kao predstavnica stacionarnih iterativnih metoda, te metode konjugiranih gradijenata kao predstavnice nestacionarnih iterativnih metoda.

1.1 Jacobijeva metoda

Pogledajmo sljedeći rastav matrice $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$:

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ a_{31} & a_{32} & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & & \ddots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \ldots & a_{nn-1} & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & a_{22} & 0 & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & a_{33} & \ldots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & a_{nn} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0 & a_{12} & a_{13} & \ldots & a_{1n} \\ 0 & 0 & a_{23} & \ldots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & a_{n-1n} \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \end{bmatrix}. \tag{1.10}$$

Jasno se vidi da je $A = L + D + U$.

Iterativna metoda koju dobivamo iz (1.1) za izbor matrica $M = D$ i $N = L + U$, gdje su L, D i U definirane kao u (1.10) zovemo *Jacobijeva metoda.* S obzirom na izbor matrica M i N, iterativni postupak poprima sljedeći oblik:

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

za sve $k \in \mathbb{N}$, pa konvergencija promatrane metode ovisi o svojstvima matrice C iz (1.3), koja za ovu metodu ima oblik $C_J = -D^{-1}(L + U)$. Uzevši u obzir da je matrica D dijagonalna, njezin inverz se izračunava trivijalno, pa time konstrukcija matrice C_J nije *skupa*[1], vremenska složenost je $\mathcal{O}(n)$.
Ono što nas osobito zanima kod ove iterativne metode je njezina konvergencija. No, međutim, samo za matrice s posebnim svojstvima postoje rezultati koji govore o tome. Stoga najprije definirajmo pojam *strogo dijagonalne dominantnosti.*

Definicija 1.1.1 *Za matricu A kažemo da je:*

(a) strogo dijagonalno dominantna po recima ako vrijedi

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|, \qquad i = 1, \dots, n$$

(b) strogo dijagonalno dominantna po stupcima ako vrijedi

$$|a_{jj}| > \sum_{\substack{i=1 \\ i\neq j}}^{n} |a_{ij}|, \qquad j = 1, \dots, n$$

Za matrice koje zadovoljavaju takve uvjete vrijedi sljedeći teorem.

Teorem 1.1.1 *Neka je matrica A strogo dijagonalno dominantna i po recima i po stupcima. Tada Jacobijeva metoda konvergira.*

Dokaz. Lako se vidi da su elementi matrice $C_J = -D^{-1}(L + U)$ oblika

$$c_{ij} = \begin{cases} -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}, & \text{ako je } i \neq j \\ 0, & \text{za } i = j. \end{cases}$$

Tada prema Definiciji 1.1.1 vrijedi

$$||C_J||_\infty = \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^{n} |(C_J)_{ij}| = \max_{i=1,\dots,n} \frac{1}{|a_{ii}|} \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n} |a_{ij}|.$$

Stroga dijagonalna dominacija matrice povlači da je $||C_J||_\infty < 1$, tj. da je $\rho(A) < 1$, a to prema Teoremu 1.1 znači da metoda konvergira. □

[1] Nije potrebno puno računskih operacija za njezin izračun.

1.2 Gauss-Seidelova metoda

U Jacobijevoj metodi mogli smo primjetiti jedan nedostatak, a to je da se pri izračunavanju $x^{(k+1)}$ aproksimacije rješenja svaka komponenta tog vektora izračunavala pomoću komponenata vektora $x^{(k)}$, tj. računali smo ih sekvencionalno, odnosno serijski. Međutim, ako bismo Jacobijevu metodu modificirali na način da prethodno izračunate komponente aproksimacije $x^{(k+1)}$ koristimo prilikom računanja sljedećih komponenti tog istog vektora, omogućili bismo da komponente od $x^{(k+1)}$ prebrišu stare vrijednosti komponenti od $x^{(k)}$ čim se izračunaju, dok su u Jacobijevoj metodi ostajale. Onda nam više ne bi bio potreban dodatni pomoćni vektor za pamćenje komponenti prethodne iteracije $x^{(k)}$. Opisanu prednost nalazimo u Gauss-Seidelovoj metodi.
Za matrice M i N iz (1.1) uzmimo $M = L + D$, a $N = U$. Tada imamo sljedeću formulu za iterativni postupak:

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

pri čemu je matrica konvergencije za Gauss-Seidelovu metodu $C_{GS} = -(L + D)^{-1}U$.
Prema tome, komponente vektora $x^{(k+1)}$ izračunavaju se na sljedeći način:

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

S obzirom na navedene razlike između Jacobijeve i Gauss-Seidelove metode i uzevši činjenicu da je Gauss-Seidelova metoda poboljšanje Jacobijeve, moglo bi se pomisliti da ona brže konvergira od Jacobijeve, no to nije uvijek slučaj.

Navedimo još nekoliko teorema o konvergenciji Jacobijeve i Gauss-Seidelove metode. (Za dokaz vidi [2].)

Teorem 1.2.1 *Ako je matrica $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ simetrična i pozitivno definitna, onda Gauss-Seidelova metoda za rješavanje sustava $Ax = b$ konvergira za svaki početni vektor $x^{(0)}$.*

Teorem 1.2.2 *Neka je A trodijagonalna matrica*[2]*. Tada ili i Jacobijeva i Gauss-Seidelova metoda za rješavanje sustava $Ax = b$ konvergiraju ili obje divergiraju. Ako obje konvergiraju, Gauss-Seidelova metoda konvergira brže.*

Teorem 1.2.3 *Ako je A strogo dijagonalno dominantna po recima, Jacobijeva i Gauss-Seidelova metoda konvergiraju. Preciznije,*

$$||C_{GS}||_\infty \leq ||C_J||_\infty < 1.$$

Unatoč navedenim primjerima i rezultatima koji upućuju na činjenicu da je pod nekim uvjetima Gauss-Seidelova metoda brža od Jacobijeve, ne postoji nikakav generalni rezultat te vrste. Čak štoviše, postoje nesimetrične matrice za koje Jacobijeva metoda konvergira, a Gauss-Seidelova ne, kao i za koje Gauss-Seidelova konvergira a Jacobijeva divergira, što ćemo vidjeti u trećem poglavlju ovog završnog rada.

[2]Ima netrivijalnu glavnu dijagonalu, te dijagonalu iznad i ispod, dok su ostali elementi jednaki 0.

1.3 Metoda konjugiranih gradijenata

Metoda konjugiranih gradijenata (engl. *Conjugate Gradient Method*), skraćeno CG metoda je zapravo metoda kod koje unaprijed odabiremo skup A-ortogonalnih vektora[3], odnosno smjerove traganja $d^{(0)}, d^{(1)}, \ldots, d^{(n)}$ koje konstruiramo primjenom Gram-Schmidtovog postupka A-ortogonalizacije na reziduale, tj. uzimamo $d^{(0)}, d^{(1)}, \ldots, d^{(i)}$ koji čine A-ortonormiranu bazu za span$\{r^{(0)}, r^{(1)}, \ldots, r^{(k-1)}\}$.

Prije nego se upustimo u analiziranje metode konjugiranih gradijenata, podsjetimo se Gram-Schmidtovog postupka ortogonalizacije.
Neka je $(O; \vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$ pravokutni koordinatni sustav u prostoru. Za dani skup linearno nezavisnih vektora $(\vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ iz skupa svih radijvektora s fiksnom točkom O u prostoru, moguće je definirati ortonormiranu bazu $(\vec{u}, \vec{v}, \vec{w})$ na tom istom skupu gdje je:

$$\begin{aligned}
\vec{u} &= \frac{\vec{a}}{||\vec{a}||}, \\
\vec{v} &= \frac{\vec{b}'}{||\vec{b}'||}, \qquad \vec{b}' = \vec{b} - (\vec{b} \cdot \vec{u})\vec{u} \\
\vec{w} &= \frac{\vec{c}'}{||\vec{c}'||}, \qquad \vec{c}' = \vec{c} - (\vec{c} \cdot \vec{u})\vec{u} - (\vec{c} \cdot \vec{v})\vec{v}.
\end{aligned}$$

Vratimo se na metodu konjugiranih gradijenata. U svakom koraku metode biramo točku

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} + \alpha^{(k)} d^{(k)}$$

s minimalnom A-normom[4] pogreške, odnosno u svakom smjeru $d^{(k)}$ pravimo točno jedan korak takve duljine da poništava komponentu vektora pogreške $e^{(k)}$ u smjeru $Ad^{(k)}$. U sljedećoj iteraciji biramo pogrešku $e^{(k+1)}$ takvu da bude jednaka početnoj pogrešci, kojoj su odstranjene sve komponente u smjerovima $Ad^{(0)}, \ldots, Ad^{(k)}$, odnosno ona je A-ortogonalna na $d^{(0)}, \ldots, d^{(k)}$.
Ukoliko uzmemo $r^{(k+1)} = r^{(k)} - \alpha^{(k)} A d^{(k)}$, te $e^{(k+1)} = e^{(k)} - \alpha^{(k)} d^{(k)}$, primjenom Gram-Schmidtovog postupka A-ortogonalizacije na smjerovima $d^{(0)}, \ldots, d^{(i)}$ imat ćemo

$$d^{(k)} = r^{(k)} - \sum_{i=0}^{k-1} \frac{(r^{(k)})^* A d^{(i)}}{(d^{(i)})^* A d^{(i)}} d^{(i)} = r^{(k)} - \frac{(r^{(k)})^* A d^{(k-1)}}{(d^{(k-1)})^* A d^{(k-1)}} d^{(k-1)}.$$

U svrhu jednostavnosti, iskoristimo jednakost $(r^{(k)})^* r^{(k)} = (d^{(k)})^* r^{(k)}$, te označimo sa $d^{(k)} =$

[3] Dva vektora $d^{(i)}$ i $d^{(j)}$ su A-ortogonalna ili konjugirana ako vrijedi da je $\langle d^{(i)}, d^{(j)} \rangle_A = \langle Ad^{(i)}, d^{(j)} \rangle = 0$. Lako se može provjeriti da su A-ortogonalni vektori linearno nezavisni.

[4] A-norma definira se kao $||z||_A = \sqrt{z^* A z}$.

$r^{(k)} + \beta^{(k)} d^{(k-1)}$, pri čemu $\beta^{(k)}$ iznosi

$$
\begin{aligned}
\beta^{(k)} &= -\frac{(r^{(k)})^* A d^{(k-1)}}{(d^{(k-1)})^* A d^{(k-1)}} \\
&= -\frac{\frac{1}{\alpha^{(k-1)}}((r^{(k)})^* r^{(k-1)} - (r^{(k)})^* r^{(k)})}{\frac{1}{\alpha^{(k-1)}}((d^{(k-1)})^* r^{(k-1)} - (d^{(k-1)})^* r^{(k)})} \\
&= \frac{(r^{(k)})^* r^{(k)}}{(d^{(k-1)})^* r^{(k-1)}} \\
&= \frac{(r^{(k)})^* r^{(k)}}{(r^{(k-1)})^* r^{(k-1)}}.
\end{aligned}
$$

Točku minimuma duž smjera traganja $d^{(k)}$ pronalazimo kao nultočku derivacije funkcije $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}, F(\alpha^{(k)}) \equiv (e^{(k+1)})^T A e^{(k+1)}$, tj.

$$
\begin{aligned}
F'(\alpha^{(k)}) &= \frac{d}{d\alpha^{(k)}}[(e^{(k)} - \alpha^{(k)} d^{(k)})^* A (e^{(k)} - \alpha^{(k)} d^{(k)})] \\
&= -2(d^{(k)})^* A e^{(k)} + 2\alpha^{(k)} (d^{(k)})^* A d^{(k)} \\
&= 0 \qquad (1.11)
\end{aligned}
$$

iz čega uvrštavajući $r^{(k)} = Ae^{(k)}$, te $(r^{(k)})^* r^{(k)} = (d^{(k)})^* r^{(k)}$ dobivamo

$$\alpha^{(k)} = \frac{(d^{(k)})^* r^{(k)}}{(d^{(k)})^* A d^{(k)}} = \frac{(r^{(k)})^* r^{(k)}}{(d^{(k)})^* A d^{(k)}}.$$

Navedimo još rezultat o konvergenciji metode konjugiranih gradijenata.
(Za dokaz vidjeti [1].)

Teorem 1.3.1 *Metoda konjugiranih gradijenata zadovoljava*

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

2 Implemetacija metoda u programskom jeziku MATLAB

U sljedećim potpoglavljima bit će predstavljene učinkovite implementacije promatranih iterativnih metoda u programskom jeziku MATLAB.
Kao što je već u uvodu ovog završnog rada napomenuto, MATLAB je programski jezik visoke razine i interaktivna okolina za numeričko i matrično računanje, te za vizualizaciju i programiranje. Sam naziv je nastao kao kratica od engleskih riječi MATrix LABoratory. Upravo zbog mogućnosti manipuliranja matricama, iscrtavanja funkcija i podataka, te implementacije algoritama i stvaranje grafičkih korisničkih sučelja nametnuo se kao izvrstan alat koji je poslužio u izradi ovog završnog rada.

2.1 Implementacija Jacobijeve metode

```
function [koraci, spradius]=jacobi(A,x,b, tolerancija)

d=diag(A);
D=diag(d);
LU=A-D;
[m,n] = size(A);

for ii=1:n
   for jj=1:m
      C(ii,jj)=-(1/D(ii,ii))*LU(ii,jj);
   end
end

eig(C)
spradius=max(abs(eig(C)));

koraci=0;

while norm(A*x-b, 2) >= tolerancija
   for kk=1:n
      x1=(1/D(kk,kk))*(b-LU*x);
   end
   x=x1;
   koraci=koraci+1;
   greska(koraci)=norm(A*x-b, 2);
end

disp(sprintf('Broj iteracija Jacobijeve metode: %d', koraci))
semilogy(greska, 'o-g')
```

Jacobijeva metoda je ovdje definirana kao funkcija koja prima vrijednosti matrice sustava A, početnu aproksimaciju x, vektor b, te toleranciju. Ti parametri će biti zadani tijekom generiranja primjera u grafičkom korisničkom sučelju. U prve dvije linije koda definiramo matrice koje predstavljaju rastav matrice A. Matrica C je Jacobijeva matrica konvergencije, te provjeravamo njezin spektralni radijus kako bismo dobili uvid u konvergenciju metode za danu matricu A. Ako je njezin spektralni radijus manji od 1, tada metoda konvergira. Pri ulasku u while petlju nailazimo na njezin uvjet koji provjerava je li Euklidska norma reziduala veća ili jednaka toleranciji. Dokle god je ona veća ili jednaka toleranciji, while petlja se izvršava. Unutar nje definiramo for petlju unutar koje izračunavamo sljedeću aproksimaciju. Pri izlasku iz for petlje, vrijednost prijašnje aproksimacije prebrišemo sadašnjom aproksimacijom te korak iteracije povećamo za jedan. Nakon prolaska kroz while petlju, dobili smo aproksimaciju sa željenom toleranciju, te ispisujemo broj koraka Jacobijeve metode i crtamo grešku u ovisnosi o iteracijama.

2.2 Implementacija Gauss-Seidelove metode

```
function[koraci, spradius]=gaussseidel(A,x,b, tolerancija)

D=diag(diag(A));
LD =tril(A);
U=A-(LD);
[m,n] = size(A);
C=zeros(n);

for kk= 1:n
   for ii = 1:n
      C(kk,ii) = (-U(kk,ii) - LD(kk,1:(kk-1))*C(1:(kk-1),ii))/LD(kk,kk);
   end
end

spradius=max(abs(eig(C)));
koraci=0;

x1=x;
while norm(A*x-b, 2) >= tolerancija
   for i = 1:n
      x1(i) = (1/A(i, i))*(b(i) - A(i, 1:n)*x1 +  A(i, i)*x1(i));
   end
   x=x1;
   koraci=koraci + 1;
   greska(koraci)=norm(A*x-b, 2);
end

disp(sprintf('Broj iteracija Gauss-Seidelove metode: %d', koraci))
semilogy(greska, 'o-r')
```

Kao i kod Jacobijeve metode, prvo definiramo rastav matrice A na dijagonalnu matricu D, donjetrokutastu matricu LD i strogo gornje trokutastu matricu U. Potom računamo matricu konvergencije Gauss-Seidelove metode prolazeći kroz dvije for petlje, a nakon toga izračunavamo spektralni radijus te iste matrice. Spektralni radijus će nam reći hoće li metoda za dane vrijednosti konvergirati. While petlja se izvršava dokle god je Euklidska norma reziduala veća ili jednaka danoj toleranciji. Unutar for petlje računamo sljedeću aproksimaciju. Nakon završetka for petlje staroj aproksimaciji pridružujemo vrijednost nove aproksimacije, te povećavamo broj koraka iteracije za 1. Nakon što while petlja završi, imamo aproksimaciju do na željenu toleranciju, te ispisujemo broj koraka Gauss-Seidelove metode i crtamo grešku kroz iteracije.

2.3 Implementacija metode konjugiranih gradijenata

```
function[koraci, spradius]=mkg(A,x,b, tolerancija)

r0=b-A*x
d0=r0;
koraci=0;

while norm(A*x-b, 2) >= tolerancija
   z=A*d0;
   alfa0=(r0'*r0)/(d0'*z);
   x1=x+alfa0*d0;
   r1=r0-alfa0*z;
   beta1=(r1'*r1)/(r0'*r0);
   d1=r1+beta1*d0;
   koraci=koraci + 1;
   greska(koraci)=norm(A*x-b, 2);
   x=x1;
   r0=r1;
   d0=d1;
end

disp(sprintf('Broj iteracija metode konjugiranih gradijenata: %d', koraci))
semilogy(greska, 'o-r')
```

U implementaciji metode konjugiranih gradijenata u programskom jeziku MATLAB korišteni su prethodno navedeni rezultati o toj metodi. Prvo je definiran rezidual kao razlika vektora b i vektora Ax pri čemu je x početna aproksimacija rješenja. Početni smjer traganja je potom izjednačen s rezidualom, a broj koraka, odnosno iteracija je postavljen na 0. Potom se ulazi u while petlju koja se izvršava dokle god je Euklidska norma reziduala veća ili jednaka zadanoj toleranciji. Potom slijedi definiranje svih rezultata ove metode. Na kraju se poziva funkcija ispisa koja ispisuje broj iteracija metode konjudiranih gradijenata te pozivamo fukciju koja na logaritamski skaliranim koordinatnim osima crta pogrešku u izračunu aproksimacija kroz iteracije.

3 Usporedba brzine konvergencije metoda za nekoliko klasa problema

Primjer 3.1 *Problem koji ćemo proučiti je slabo dijagonalno dominantna matrica koja je ujedno i ireducibilna, ali nije strogo dijagonalno dominantna.*

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 1 & 1 \\ 1 & 4 & 3 \\ 2 & 1 & 4 \end{bmatrix}$$

Vrlo lako možemo pokazati da je

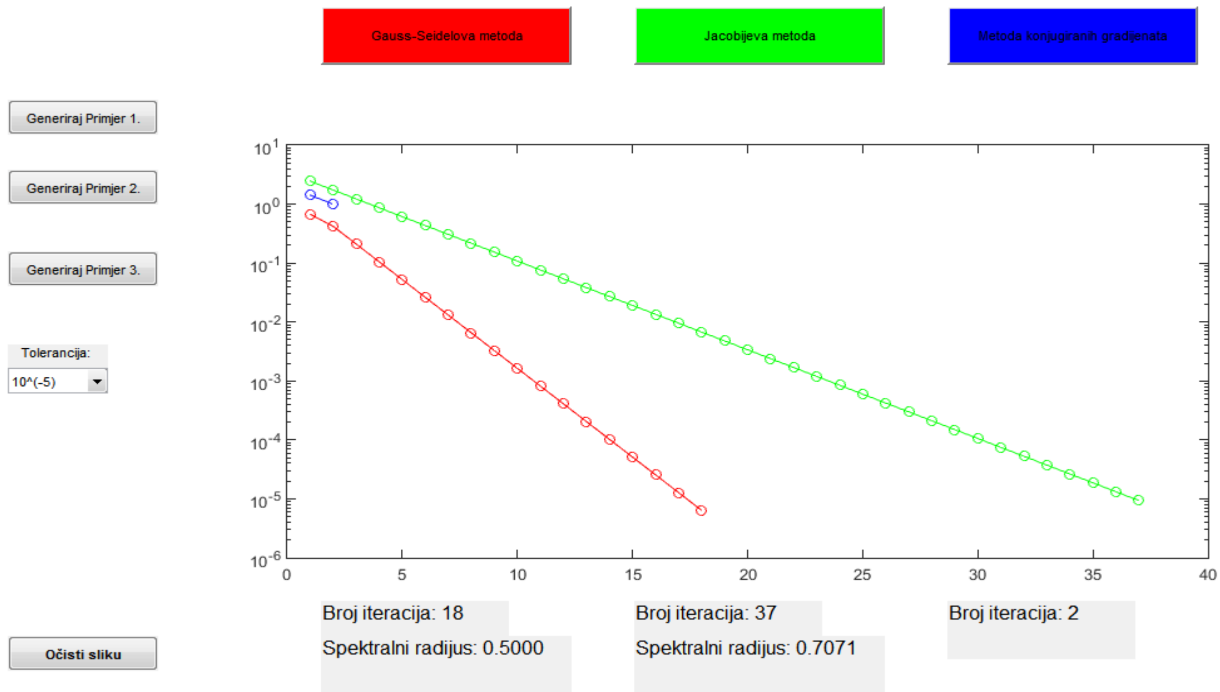
$$\rho(C_J) = 0.7251 \quad \rho(C_{GS}) = 0.3062$$

iz čega jasno vidimo da obje metode konvergiraju, ali Gauss-Seidelova konvergira brže.

Primjer 3.2 *Pogledajmo sljedeću matricu*

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

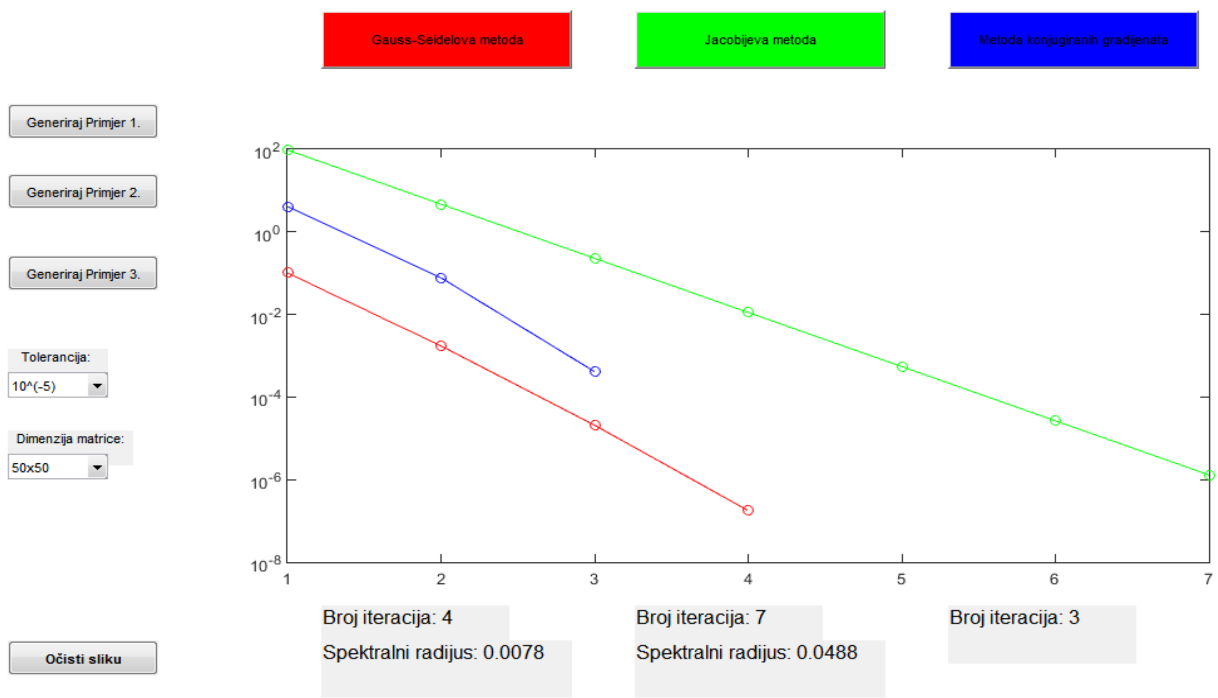
Matrica A je simetrična pozitivno definitna pa su stoga sve njezine svojstvene vrijednosti pozitivni realni brojevi ($\lambda_1 = 3.4142$, $\lambda_2 = 2$, $\lambda_3 = 0.5858$). Za vektor b iz sustava $Ax = b$ uzmimo $b = [-1 \quad 0 \quad -1]^T$ za početni vektor $x^{(0)}$ uzmimo nul-vektor, te neka željena norma reziduala bude manja od 0.00001.
Nakon implementacije u MATLAB-u, dobijemo da iterativni postupak konvergira i za Jacobijevu metodu i za Gauss-Seidelovu i za metodu konjugiranih gradijenata.



Slika 1: Ovisnost greške o broju iteracija u Primjeru 3.2

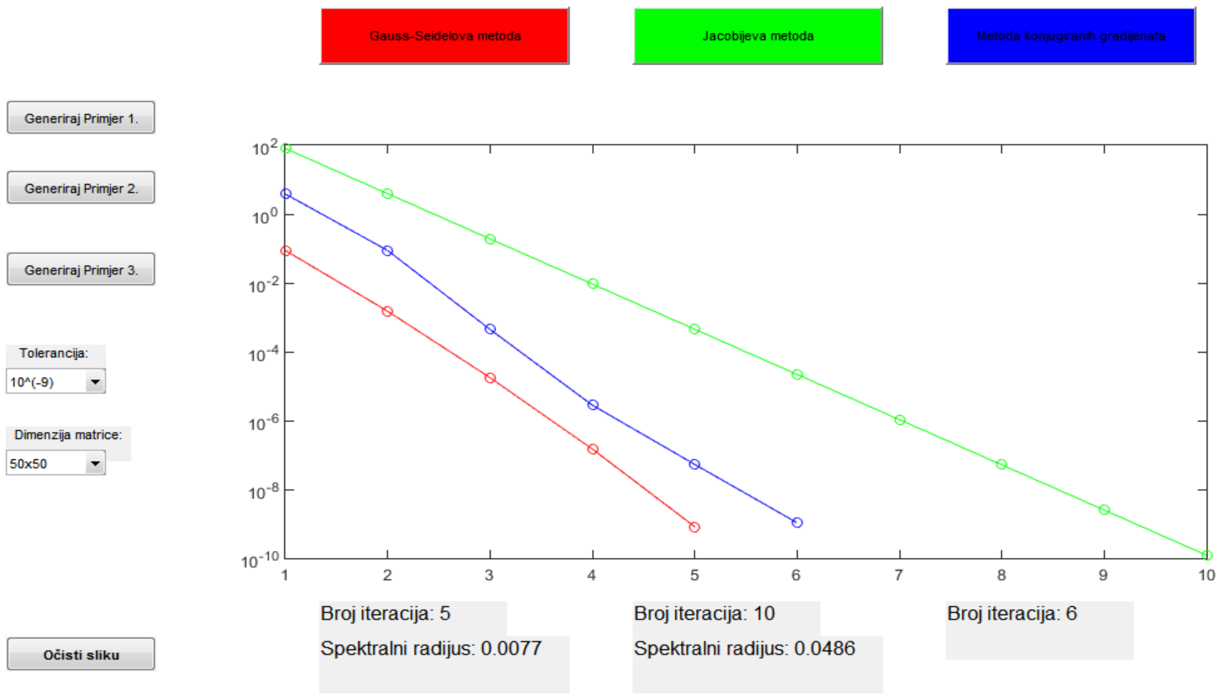
Na Slici 1. prikazano je grafičko korisničko sučelje, kraće GUI, u MATLAB-u za navedene tri metode. Implementacija GUI-a neće biti objašnjena jer je poslužilo samo u svrhu lakše vizualizacije konvergencije navedenih iterativnih metoda. Greške kroz iteracije Gauss-Seidelove metode prikazane su crvenim kružićima, Jacobijeve metode zelenim, a metode konjugiranih gradijenata plavim.
Rezultat koji nam daje osjećaj za brzinu konvergencije pojedine metode je broj iteracija potrebnih za smanjenje norme reziduala do zadane tolerancije, stoga se osvrnimo još i na taj rezultat. Broj iteracija potrebnih za postizanje aproksimacije rješenja pri čemu je norma reziduala manja od 10^{-5}, kao što smo zadali, a računamo ju u Euklidskoj normi, pomoću Gauss-Seidelove metode iznosi 18, broj iteracija pri rješavanju sustava pomoću Jacobijeve metode je čak 37, dok je broj iteracija za metodu konjugiranih gradijenata samo 2.
Uočavamo da metoda konjugiranih gradijenata konvergira u znatno manje iteracija od Jacobijeve i Gauss-Seidelove metode, kao što smo i očekivali.

Primjer 3.3 *Neka je zadana matrica 50 × 50 sa slučajno odabranim elementima iz Bernoulijeve distribucije, ali pod uvjetom da je strogo dijagonalno dominantna i pozitivno definitna. Za vektor b uzmimo također slučajno odabran vektor, početna aproksimacija rješenja neka je nul-vektor, a tolerancija neka bude* 10^{-5}*, a potom* 10^{-9} *u Euklidskoj normi.*



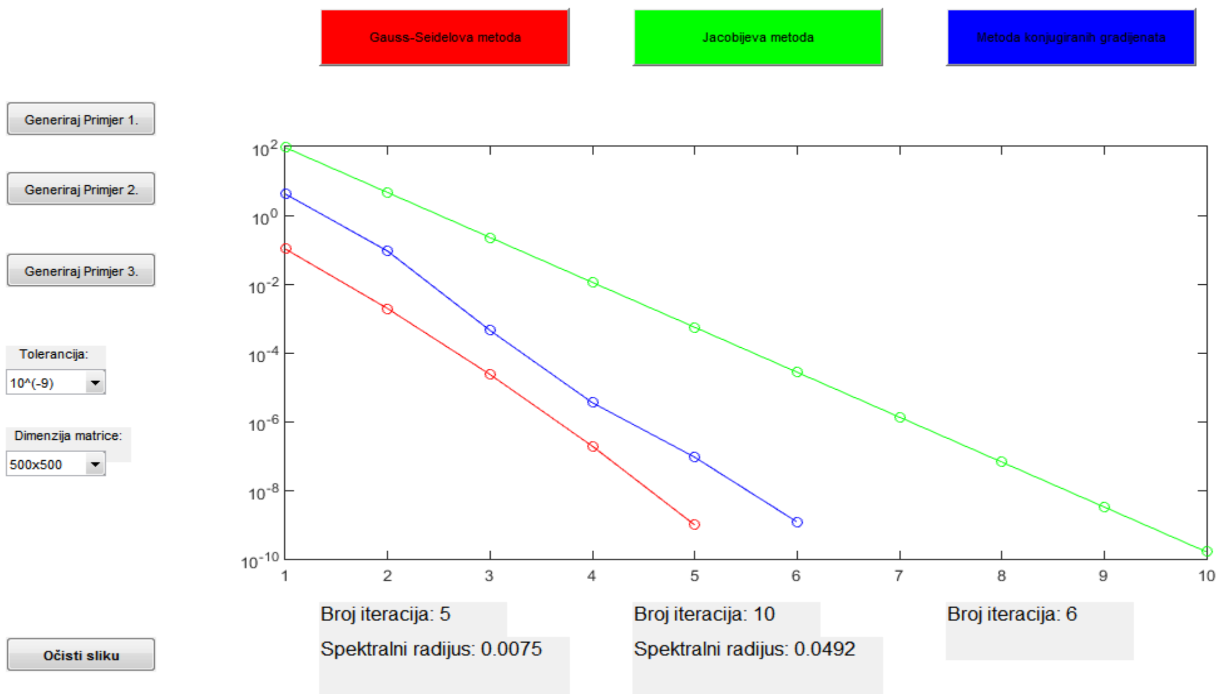
Slika 2: Ovisnost greške o broju iteracija u Primjeru 3.3

Ovdje je vidljivo da je pri toleranciji od 10^{-5} broj iteracija Gauss-Seidelove metode veći za 1 od metode konjugiranih gradijenata, dok je broj iteracija Jacobijeve metode gotovo dvostruko veći. Na Slici 3. vidimo da povećanjem tolerancije na 10^{-9} broj iteracija metode konjugiranih gradijenata raste te je veći od broja iteracija Gauss-Seidelove metode. Iz toga zaključujemo da Gauss-Seidelova metoda ima veću točnost od metode konjugiranih gradijenata za ovu klasu problema ali je metoda konjugiranih gradijenata ipak malo brža ukoliko nam je tolerancija nešto veća.



Slika 3: Ovisnost greške o broju iteracija u Primjeru 3.3

Ispitajmo još ovisnost broja iteracija i dimenzije matrice. Ukoliko je dimenzija matrice 500×500, situacije se ne mijenja, kao što vidimo na Slici 4.



Slika 4: Ovisnost greške o broju iteracija u Primjeru 3.3

Literatura

[1] N. Bosner, *Iterativne metode za rješavanje linearnih sustava*, diplomski rad, Matematički odjel, PMF, Zagreb, 2001.

[2] J. W. Demmel, *Applied Numerical Algebra*, SIAM, 1997.

[3] W. Ford, *Numerical Linear Algebra with Applications: Using MATLAB*, Academic Press, 2015.

[4] M. Rogina, Sanja Singer, Saša Singer, *Numerička analiza*, elektronički udžbenik

[5] Y. Saad, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, 2nd Edition, SIAM, 2003.

[6] N. Truhar, *Numerička linearna algebra*, Odjel za matematiku, Osijek, 2010.