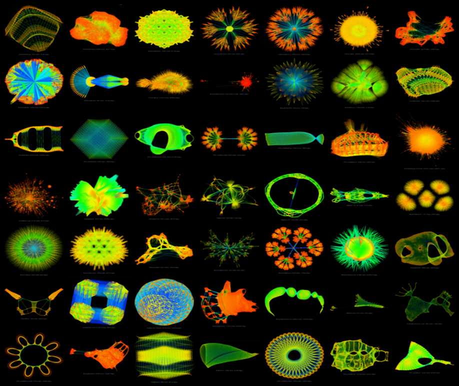
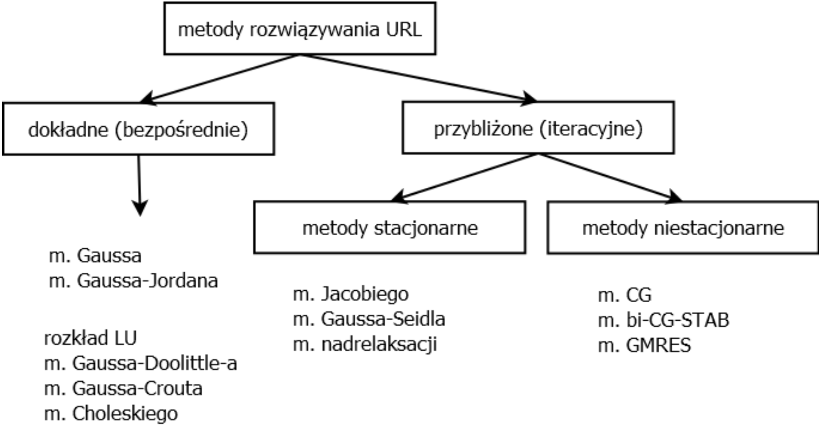
Metody numeryczne

Wykład 5

Układy równań liniowych - metody iteracyjne

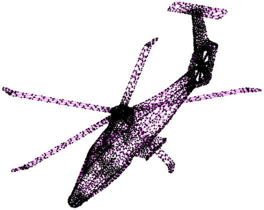


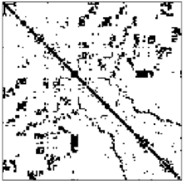
Klasyfikacja numerycznych metod rozwiązywania URL



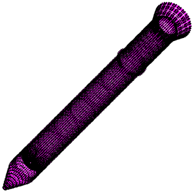
BiCG	Metoda gradientów bisprzężonych - Biconjugate Gradient BiCG
BiCGStab	Biconjugate Gradient Stabilized BiCGSTAB
CGS	Metoda kwadratowego gradientu sprzeżonego - Conjugate Gradient Squared CGS
Conjugate Gradient	Metoda gradientów sprzężonych CG
Conjugate Residual	Metoda sprzężonego residuum - Conjugate Residual Method CR
D-Lanczos	Metoda D-Lanczos
DIOM	Bezpośrednia metoda niepełnej ortogonalizacji DIOM
DQGMRES	Bezpośrednia metoda najmniejszego residuum z niepełną ortogonalizacją DQGMRES
FOM	Metoda pełnej ortogonalizacji FOM Metoda pełnej ortogonalizacji z restartem FOM(m)
GMRES	Uogólniona metoda najmniejszego residuum GMRES Uogólniona metoda najmniejszego residuum z restartem GMRES(m)
Gauss-Seidel	Metoda Gaussa-Seidela
General Conjugate Residual	Uogólniona metoda sprzężonego residuum - Generalized Conjugate Residual GCR GCR(m)
IOM	Metoda niepełnej ortogonalizacji IOM
Jacobi	Metoda Jakobiego
Lanczos for symmetric systems	Metoda Lanczosa
Minimal Residual	Metoda najmniejszego residuum (Minimal Residual MINRES)
Orthodir	ORTHODIR
Orthomin	ORTHOMIN(k)
QGMRES	Uogólniona metoda najmniejszego residuum z niepełną ortogonalizacją QGMRES
QMR	Metoda kwasi-najmniejszego residuum - Quasi Minimal Residual Method QMR
Residual Norm Steepest Descent	Metoda najmniejszego residuum w kierunku największego spadku (Residual Norm Steepest Descent)
Richardson	Najprostsza klasyczna metoda iteracyjna
SOR	Metoda SOR
Steepest Descent	Metoda największego spadku (Steepest Descent)
TFQMR	Transpose-Free QMR - TFQMR
Two-sided Lanczos (nonsymmetric)	Dwustronna metoda Lanczosa

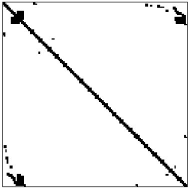
Źródło: http://www.icm.edu.pl/kdm/SOLVER/Metody˙iteracyjne





Matrix properties	
number of rows	7,920
number of columns	7,920
nonzeros	31,680
structural full rank?	yes
structural rank	7,920
# of blocks from dmperm	1
# strongly connected comp.	1
explicit zero entries	0
nonzero pattern symmetry	symmetric
numeric value symmetry	symmetric
type	binary
structure	symmetric
Cholesky candidate?	yes
positive definite?	no

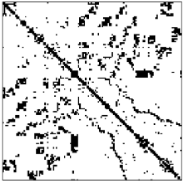




Matrix properties	
number of rows	10,429
number of columns	10,429
nonzeros	103,599
structural full rank?	yes
structural rank	10,429
# of blocks from dmperm	1
# strongly connected comp.	1
explicit zero entries	0
nonzero pattern symmetry	symmetric
numeric value symmetry	symmetric
type	binary
structure	symmetric
Cholesky candidate?	yes
positive definite?	no

Źródło: http://www.cise.ufl.edu/research/sparse/matrices/

Macierze rzadkie

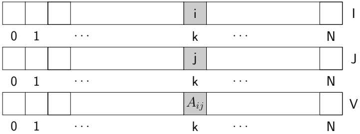


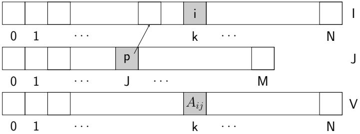
Metody bezpośrednie? → nieodpowiednie → pojawianie się nowych niezerowych elementów w macierzy w trakcie obliczeń (ang. fill-in);

Jak wykorzystać rozrzedzenie macierzy?

Macierze rzadkie - implementacja

$\mathbf{A} = [a_{ij}]_{n\times m}$ o N niezerowych elementach





Format współrzędnych

$\mathbf{I}, \mathbf{J}$ – wektory typu int rozmiaru $1 \times N$,
$\mathbf{V}_{1\times N}$ – wektor typu $double$

$$A(I(k), J(k)) = V(k)$$

Zaleta: łatwa reorganizacja macierzy

Format spakowanych kolumn

(CSC - Compressed Sparse Column)
(Octave, Matlab)

$\mathbf{V}_{1\times N}$ – $double$ – kolejne niezerowe elementy $\mathbf{A}$ zapisane *kolumnami*
$\mathbf{I}_{1\times N}$ – int – nr wierszy $\mathbf{A}$ odpowiadające elementom $\mathbf{V}$
$\mathbf{J}_{1\times M}$ – int – j-ty zawiera indeks wystąpienia pierwszego elementu j-tej kolumny $\mathbf{A}$ w $\mathbf{V}$

Zaleta: oszczędność pamięci

	1	2	3	4	5	6	7	8
1	a							
2	b	c	d					
3			e					
4			f	g	h			
5					i	j		
6							k	
7								l

AIJ

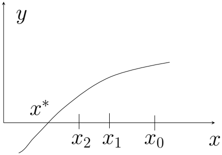
V	=	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l
I	=	1	2	2	2	3	4	4	4	5	5	6	7
J	=	1	1	2	3	3	3	4	5	5	6	7	8

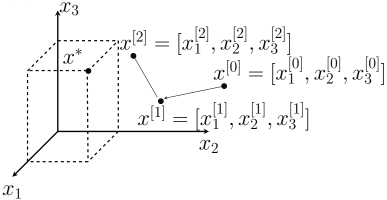
CSC

V	=	a	b	c	d	e	f	g	h	i	j	k	l
I	=	1	2	2	2	3	4	4	4	5	5	6	7
J	=	1	3	4	7	8	10	11	12				

Metody iteracyjne

Rozwiązanie uzyskiwane w wyniku iteracyjnego procesu

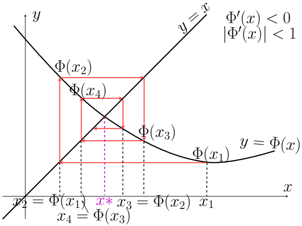




$$x_{n+1} = \Phi(x_n)$$

$$\mathbf{x}^{[n+1]} = \mathbf{G} \cdot \mathbf{x}^{[n]}$$

- $\mathbf{x}_k \to \mathbf{x}^*$ – punkt stały iteracji



- rozwiązanie przybliżone

METODA ITERACJI PROSTEJ (METODA JACOBIEGO)

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

Założenie:

$$\forall_{i\in 1,\dots,n}\ a_{ii} \neq 0$$

$$\begin{cases} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & \dots & + & a_{1n}x_n & = & b_1 & /:a_{11} \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & \dots & + & a_{2n}x_n & = & b_2 & /:a_{22} \\ \vdots \\ a_{n1}x_1 & + & a_{n2}x_2 & + & \dots & + & a_{nn}x_n & = & b_n & /:a_{nn} \end{cases} \tag{2}$$

$$\begin{cases} x_1 & + & \frac{a_{12}}{a_{11}}x_2 & + & \dots & + & \frac{a_{1n}}{a_{11}}x_n & = & \frac{b_1}{a_{11}} \\ \frac{a_{21}}{a_{22}}x_1 & + & x_2 & + & \dots & + & \frac{a_{2n}}{a_{22}}x_n & = & \frac{b_2}{a_{22}} \\ \vdots \\ \frac{a_{n1}}{a_{nn}}x_1 & + & \frac{a_{n2}}{a_{nn}}x_2 & + & \dots & + & x_n & = & \frac{b_n}{a_{nn}} \end{cases} \tag{3}$$

$$\begin{cases} x_1 = \frac{b_1}{a_{11}} & & - \frac{a_{12}}{a_{11}} x_2 & \cdots & - \frac{a_{1n}}{a_{11}} x_n \\ x_2 = \frac{b_2}{a_{22}} & - \frac{a_{21}}{a_{22}} x_1 & & \cdots & - \frac{a_{2n}}{a_{22}} x_n \\ \vdots \\ x_n = \frac{b_n}{a_{nn}} & - \frac{a_{n1}}{a_{nn}} x_1 & - \frac{a_{n2}}{a_{nn}} x_2 & \cdots \end{cases} \tag{4}$$

Niech:

$$c_i = \frac{b_i}{a_{ii}}, \qquad h_{ij} = -\frac{a_{ij}}{a_{ii}}$$

$i = 1, 2, \ldots, n;\ j = 1, 2, \ldots, n; i \neq j$

$$\mathbf{x} = \mathbf{c} + \mathbf{H}\mathbf{x} \tag{5}$$

$$\mathbf{C} = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{bmatrix} 0 & h_{12} & h_{13} & \ldots & h_{1n} \\ h_{21} & 0 & h_{23} & \ldots & h_{2n} \\ \vdots \\ h_{n1} & h_{n2} & h_{n3} & \ldots & 0 \end{bmatrix} \tag{6}$$

Na podstawie tego równania konstruujemy ciąg przybliżeń

$$\mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{C} + \mathbf{H}\mathbf{x}^{(n)} \tag{7}$$

$n \in N, \mathbf{x}^{(0)}$ – dowolne, najczęściej $\mathbf{x}^{(0)} = \mathbf{C}$

$\rightarrow$ metoda Banacha (W2)

Warunek konieczny zbieżności ciągu kolejnych przybliżeń

$$\forall_{i\in 1,\dots,n} \sum_{j=1}^{n} |h_{ij}| < 1 \quad \vee \quad \forall_{j\in 1,\dots,n} \sum_{i=1}^{n} |h_{ij}| < 1 \tag{8}$$

$$\begin{bmatrix} 0 & h_{12} & h_{13} & \dots & h_{1n} \\ h_{21} & 0 & h_{23} & \dots & h_{2n} \\ \vdots & & & & \\ h_{n1} & h_{n2} & h_{n3} & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

Równoważnie

$$\forall_{i\in 1,\dots,n} \ |a_{ii}| > \sum_{j=1, j\neq i}^{n} |a_{ij}| \quad \vee \quad \forall_{j\in 1,\dots,n} \ |a_{ii}| > \sum_{i=1, i\neq j}^{n} |a_{ij}| \tag{9}$$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & & & & \\ a_{n1} & a_{n2} & a_{n3} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

Oszacowanie błędu metody iteracji prostej

$$||\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(m)}|| \leqslant \frac{||\mathbf{H}||^{m+1}}{1 - ||\mathbf{H}||} ||x^{(0)}||$$

gdzie

$$||\mathbf{x}|| = ||[x_1, x_2, \ldots, x_n]|| = \sum_{j=1}^{n} |x_i|$$

$$\begin{aligned} ||\mathbf{H}|| = \max\{ \quad & ||[h_{11}, h_{12}, \ldots, h_{1n}]||, ||[h_{21}, h_{22}, \ldots, h_{2n}]||, \ldots, \\ & ||[h_{n1}, h_{n2}, \ldots, h_{nn}]||\} \end{aligned}$$

Przykład

Ile iteracji metody Jacobiego jest potrzebnych aby obliczyć rozwiązanie z dokładnością do ε?

$$||\mathbf{x}^* - \mathbf{x}^{(m)}|| \leqslant \frac{||\mathbf{H}||^{m+1}}{1 - ||\mathbf{H}||} ||x^{(0)}|| < \varepsilon$$

$$||\mathbf{H}||^{m+1} < \frac{1 - ||\mathbf{H}||}{||x^{(0)}||}\varepsilon \qquad / \log$$

$$\log ||\mathbf{H}||^{m+1} < \log \left(\frac{1 - ||\mathbf{H}||}{||x^{(0)}||}\varepsilon \right)$$

$$(m+1) \log ||\mathbf{H}|| < \log \left(\frac{1 - ||\mathbf{H}||}{||x^{(0)}||}\varepsilon \right)$$

$$m + 1 > \frac{\log \left(\frac{1 - ||\mathbf{H}||}{||x^{(0)}||}\varepsilon \right)}{\log ||\mathbf{H}||}$$

$$m > \frac{\log \left(\frac{1 - ||\mathbf{H}||}{||x^{(0)}||}\varepsilon \right)}{\log ||\mathbf{H}||} - 1$$

Zad.1. Rozwiąż układ równań metodą iteracji prostej.

$$\begin{bmatrix} -1 & 5 & -1 \\ 2 & 4 & 8 \\ 3 & 1 & -1 \end{bmatrix} \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 10 \\ 2 \\ 6 \end{bmatrix} \qquad \text{Rozw. : } \mathbf{x} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{10}$$

Aby układ spełniał warunki zmieniamy kolejność wierszy

$$\begin{bmatrix} 3 & 1 & -1 \\ -1 & 5 & -1 \\ 2 & 4 & 8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 6 \\ 10 \\ 2 \end{bmatrix} \tag{11}$$

$$\begin{cases} 3x_1 + x_2 - x_3 = 6 \\ -x_1 + 5x_2 - x_3 = 10 \\ 2x_1 + 4x_2 + 8x_3 = 2 \end{cases} \tag{12}$$

Sprawdzanie warunków koniecznych na zbieżności ciągu

$$\begin{aligned} |a_{11}| &\overset{?}{>} |a_{12}| + |a_{13}| \\ |a_{22}| &\overset{?}{>} |a_{21}| + |a_{23}| \\ |a_{33}| &\overset{?}{>} |a_{31}| + |a_{32}| \end{aligned}$$

Sprawdzanie warunków koniecznych na zbieżności ciągu

$$
\begin{array}{lll}
|a_{11}| \stackrel{?}{>} |a_{12}| + |a_{13}| & 3 > 1 + 1 & \checkmark \\
|a_{22}| \stackrel{?}{>} |a_{21}| + |a_{23}| & 5 > 1 + 1 & \checkmark \\
|a_{33}| \stackrel{?}{>} |a_{31}| + |a_{32}| & 8 > 2 + 4 & \checkmark
\end{array}
$$

Sprawdzanie warunków koniecznych na zbieżności ciągu

$$
\begin{array}{llll}
|a_{11}| \overset{?}{>} |a_{12}| + |a_{13}| & 3 > 1 + 1 & \checkmark \\
|a_{22}| \overset{?}{>} |a_{21}| + |a_{23}| & 5 > 1 + 1 & \checkmark \\
|a_{33}| \overset{?}{>} |a_{31}| + |a_{32}| & 8 > 2 + 4 & \checkmark
\end{array}
$$

$$
\left\{
\begin{array}{rcrcrcl}
x_1 & + & \frac{1}{3}x_2 & - & \frac{1}{3}x_3 & = & 2 \\
-\frac{1}{5}x_1 & + & x_2 & - & \frac{1}{5}x_3 & = & 2 \\
\frac{1}{4}x_1 & + & \frac{1}{2}x_2 & + & x_3 & = & \frac{1}{4}
\end{array}
\right.
$$

$\Rightarrow$

$$
\begin{array}{rclcrcrcr}
x_1 & = & 2 & - & & & \frac{1}{3}x_2 & + & \frac{1}{3}x_3 \\
x_2 & = & 2 & + & \frac{1}{5}x_1 & & & + & \frac{1}{5}x_3 \\
x_3 & = & \frac{1}{4} & - & \frac{1}{4}x_1 & - & \frac{1}{2}x_2 & &
\end{array}
$$

$$
C = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ \frac{1}{4} \end{bmatrix}, \qquad H = \begin{bmatrix} 0 & -1/3 & 1/3 \\ 1/5 & 0 & 1/5 \\ -1/4 & -1/2 & 0 \end{bmatrix}, \qquad x^0 = C
$$

$$x^{(1)} = C + Hx^{(0)}$$

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1/4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1/3 & 1/3 \\ 1/5 & 0 & 1/5 \\ -1/4 & -1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1/4 \end{bmatrix}$$

$$x^{(1)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1/4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} -\frac{2}{3} + \frac{1}{12} \\ \frac{2}{5} + \frac{1}{20} \\ -\frac{1}{2} - 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \cdot \frac{5}{12} \\ 2 \cdot \frac{45}{100} \\ -\frac{5}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{17}{12} \\ \frac{49}{20} \\ -\frac{5}{4} \end{bmatrix}$$

$$x^{(2)} = C + Hx^{(1)}$$

$$x^{(2)} = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1/4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & -1/3 & 1/3 \\ 1/5 & 0 & 1/5 \\ -1/4 & -1/2 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{17}{12} \\ \frac{49}{20} \\ -\frac{5}{4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.7667 \\ 2.0333 \\ -1.3292 \end{bmatrix}$$

Zapis macierzowy

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$$

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} + \mathbf{D} + \mathbf{U}$$

$$\begin{bmatrix} * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \\ * & * & * & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & * & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & * & 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} * & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & * & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 & * & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

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

$$\mathbf{Dx} = -(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x} + \mathbf{b}$$

Jeśli $det(\mathbf{D}) \neq 0$

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

gdzie $D^{-1} = diag(1/d_{ii})$
Metoda Jacobiego

$$\mathbf{x^{(n+1)}} = -\mathbf{D^{-1}}(\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x^{(n)}} + \mathbf{D^{-1}b}$$

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

Metoda Gaussa-Seidla

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

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

$$(\mathbf{L}+\mathbf{D})\mathbf{x}^{(\mathbf{n+1})}=-\mathbf{U}\mathbf{x}^{(\mathbf{n})}+\mathbf{b}$$

$$\mathbf{D}\mathbf{x}^{(\mathbf{n+1})}=-\mathbf{L}\mathbf{x}^{(\mathbf{n+1})}-\mathbf{U}\mathbf{x}^{(\mathbf{n})}+\mathbf{b}$$

$$\mathbf{x}^{(n+1)}=-\mathbf{D}^{-1}\mathbf{L}\mathbf{x}^{(n+1)}-\mathbf{D}^{-1}\mathbf{U}x^{(n)}+\mathbf{D}^{-1}\mathbf{b}$$

Metoda Jacobiego

$$\left\{\begin{array}{ccccccccccc} x_1^{(n+1)} & = & c_1 & & & + & h_{12}x_2^{(n)} & + & h_{13}x_3^{(n)} & + & \cdots \\ x_2^{(n+1)} & = & c_2 & + & h_{21}x_1^{(n)} & & & + & h_{23}x_3^{(n)} & + & \cdots \\ x_3^{(n+1)} & = & c_3 & + & h_{31}x_1^{(n)} & + & h_{32}x_2^{(n)} & & & + & \cdots \\ \vdots & & & & & & & & & & \end{array}\right.$$

Metoda Gaussa-Seidla

$$\left\{\begin{array}{ccccccccccc} x_1^{(n+1)} & = & c_1 & & & + & h_{12}x_2^{(n)} & + & h_{13}x_3^{(n)} & + & \cdots \\ x_2^{(n+1)} & = & c_2 & + & h_{21}x_1^{(n+1)} & & & + & h_{23}x_3^{(n)} & + & \cdots \\ x_3^{(n+1)} & = & c_3 & + & h_{31}x_1^{(n+1)} & + & h_{32}x_2^{(n+1)} & & & + & \cdots \\ \vdots & & & & & & & & & & \end{array}\right.$$

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

$r_i^{(n)}$ – bieżąca poprawka rozwiązania

Przykład:

$$\begin{cases} 4x_1 - x_2 - x_3 = 3 \\ -2x_1 + 6x_2 + x_3 = 9 \\ -x_1 + x_2 + 7x_3 = -6 \end{cases}$$

$$\begin{cases} 4x_1^{(k+1)} - x_2^{(k)} - x_3^{(k)} = 3 \\ -2x_1^{(k+1)} + 6x_2^{(k+1)} + x_3^{(k)} = 9 \\ -x_1^{(k+1)} + x_2^{(k+1)} + 7x_3^{(k+1)} = -6 \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1^{(1)} = 3/4 + x_2^{(0)}/4 + x_3^{(0)}/4 \\ x_2^{(1)} = 9/6 + 2x_1^{(1)}/6 + x_3^{(0)}/6 \\ x_3^{(1)} = -6/7 + x_1^{(1)}/7 - x_2^{(0)}/7 \end{cases}$$

$$x_0 = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, x_3^{(0)}) = (0,0,0)$$

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

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

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix}, D^{-1} = \begin{bmatrix} 1/4 & 0 & 0 \\ 0 & 1/6 & 0 \\ 0 & 0 & 1/7 \end{bmatrix}, U = \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = -\mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}\mathbf{x}^{(1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(0)} - \mathbf{b})$$

$$\mathbf{x}^{(1)} = -\begin{bmatrix} \frac{1}{4} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{6} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{7} \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ -2 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \end{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)} + \begin{bmatrix} 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 3 \\ 9 \\ -6 \end{bmatrix} \right)$$

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2/6 \\ 1/7 \end{bmatrix} \mathbf{x}^{(1)} + \begin{bmatrix} 3/4 \\ 9/6 \\ -6/7 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3/4 \\ 7/4 \\ -1 \end{bmatrix}$$

$$x^{(1)} = (x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}) = (0.750, 1.750, -1.000)$$

$$\begin{cases} x_1^{(2)} = 3/4 + x_2^{(1)}/4 + x_3^{(1)}/4 \\ x_2^{(2)} = 9/6 + 2x_1^{(2)}/6 + x_3^{(1)}/6 \\ x_3^{(2)} = -6/7 + x_1^{(2)}/7 - x_2^{(2)}/7 \end{cases}$$

$$x_1^{(2)} = 3/4 + 1.750/4 - 1.000/4$$
$$x_2^{(2)} = 9/6 + 2x_1^{(2)}/6 - 1.000/6$$
$$x_3^{(2)} = -6/7 + x_1^{(2)}/7 - x_2^{(2)}/7$$

$$x_1^{(2)} = 3/4 + 1.750/4 - 1.000/4 = 0.938$$
$$x_2^{(2)} = 9/6 + 2x_1^{(2)}/6 - 1.000/6 = 1.979$$
$$x_3^{(2)} = -6/7 + x_1^{(2)}/7 - x_2^{(2)}/7 = -1.006$$

$$x^{(2)} = (x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, x_3^{(2)}) = (0.938, 1.979, -1.006)$$

k	$x_1^{(k)}$	$x_2^{(k)}$	$x_3^{(k)}$
0	0.000	0.000	0.000
1	0.750	1.750	-1.000
2	0.938	1.979	-1.006
3	0.993	1.999	-1.001
4	0.999	2.000	-1.000
5	1.000	2.000	-1.000

$$x^* = (1.000, 2.000, -1.000)$$

Metoda SOR

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

ω – parametr relaksacji, zbieżność $\Leftrightarrow \omega \in (0, 2)$
$\omega > 1$ – metoda kolejnych nadrelaksacji (ang. Successive OverRelaxation)
$\omega \in (0, 1)$ – podrelaksacja
$\omega = 1$ – met. Gaussa-Seidla

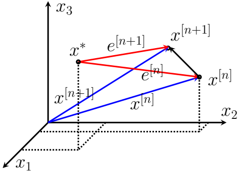
$$a_{ii} x_i^{(n+1)} = (1-\omega) a_{ii} x_i^{(n)} - \omega \left(\sum_{j=1, i>1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(n+1)} + \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(n)} - b_i \right)$$

$$\mathbf{X}^{(n+1)} = (\mathbf{D} + \omega \mathbf{L})^{-1} \left[(1-\omega) \mathbf{D} - \omega \mathbf{U} \right] + \omega (\mathbf{D} - \omega \mathbf{L})^{-1} \mathbf{b}$$

Warunki zbieżności: jak dla metody it. prostej

WARUNKI STOPU:

$\lvert x_{n+1} - x_n \rvert < \delta$	$\lvert\lvert \mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)} \rvert\rvert < \delta$ – zawodne (TODO)
	$\lvert\lvert \mathbf{Ax}^{(n)} - \mathbf{b} \rvert\rvert < \epsilon$ – zawodne
$\lvert f(x_n) \rvert < \epsilon$	$\frac{\lvert\lvert \mathbf{Ax}^{(n)} - \mathbf{b} \rvert\rvert}{\lvert\lvert \mathbf{b} \rvert\rvert} < \epsilon$
$n > n_{max}$	$n > n_{max}$



$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b} \rightarrow \text{np. m.it.pr.: } \mathbf{x}^{(n+1)} = \mathbf{C} + \mathbf{Hx}^{(n)}$$

$$||\mathbf{x}^{(n+1)} - \mathbf{x}^{(n)}|| = ||\mathbf{e}^{(n+1)} - \mathbf{e}^{(n)}|| = ||\mathbf{He}^{(n)} - \mathbf{e}^{(n)}|| = ||(\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{e}^{(n)}||$$

$$||\mathbf{Ax}^{(n)} - \mathbf{b}|| = ||\mathbf{A}(\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}^*)|| \leqslant ||\mathbf{A}|| \cdot ||(\mathbf{x}^{(n)} - \mathbf{x}^*)||$$

Metoda Jacobiego

k	x_1	x_2	x_3	$\|\|Ax^{(k)} - b\|\|$
0	2.00000	2.00000	0.25000	$1.6000e+01$
1	1.41667	2.45000	−1.25000	$4.6667e+00$
2	0.76667	2.03333	−1.32917	$4.0333e+00$
3	0.87917	1.88750	−0.95833	$1.3583e+00$
4	1.05139	1.98417	−0.91354	$1.0000e+00$
5	1.03410	2.02757	−1.00493	$3.8250e-01$
6	0.98917	2.00583	−1.02231	$2.4347e-01$
7	0.99062	1.99337	−1.00021	$1.0506e-01$
8	1.00214	1.99808	−0.99434	$6.0430e-02$
9	1.00253	2.00156	−0.99958	$2.8245e-02$
10	0.99962	2.00059	−1.00141	$1.5294e-02$
11	0.99933	1.99964	−1.00020	$7.4503e-03$
12	1.00005	1.99983	−0.99965	$3.8048e-03$
13	1.00017	2.00008	−0.99993	$1.9306e-03$
14	1.00000	2.00005	−1.00008	$9.2974e-04$

Metoda Gaussa-Seidla

k	x_1	x_2	x_3	$\|\|Ax^{(k)} - b\|\|$
0	2.00000	2.00000	0.25000	$1.6000e+01$
1	1.41667	2.33333	−1.27083	$3.3750e+00$
2	0.79861	1.90556	−0.90243	$1.1646e+00$
3	1.06400	2.03231	−1.03216	$3.8622e-01$
4	0.97851	1.98927	−0.98926	$1.2884e-01$
5	1.00716	2.00358	−1.00358	$4.2941e-02$
6	0.99761	1.99881	−0.99881	$1.4314e-02$
7	1.00080	2.00040	−1.00040	$4.7713e-03$
8	0.99973	1.99987	−0.99987	$1.5904e-03$
9	1.00009	2.00004	−1.00004	$5.3014e-04$

Metoda SOR ($\omega = 1.05$)

k	x_1	x_2	x_3	$\|\|Ax^{(k)} - b\|\|$
0	2.00000	2.00000	0.25000	$1.6000e+01$
1	1.38750	2.34387	−1.34475	$4.1353e+00$
2	0.73961	1.85573	−0.83866	$1.9019e+00$
3	1.11998	2.06629	−1.07437	$8.7623e-01$
4	0.94477	1.96947	−0.96576	$4.0349e-01$
5	1.02543	2.01406	−1.01577	$1.8580e-01$
6	0.98829	1.99353	−0.99274	$8.5560e-02$
7	1.00539	2.00298	−1.00334	$3.9399e-02$
8	0.99752	1.99863	−0.99846	$1.8143e-02$
9	1.00114	2.00063	−1.00071	$8.3545e-03$
10	0.99947	1.99971	−0.99967	$3.8471e-03$
11	1.00024	2.00013	−1.00015	$1.7715e-03$
12	0.99989	1.99994	−0.99993	$8.1577e-04$

Metoda SOR ($\omega = 0.9$)

k	x_1	x_2	x_3	$\|\|Ax^{(k)} - b\|\|$
0	2.00000	2.00000	0.25000	$1.6000e+01$
1	1.47500	2.31050	−1.12160	$4.2754e+00$
2	0.91787	1.99438	−0.99115	$4.2199e-01$
3	0.99613	2.00033	−0.99839	$2.3261e-02$
4	0.99999	2.00032	−0.99998	$3.2954e-03$
5	0.99991	2.00002	−0.99999	$4.4502e-04$

STOP:

$$||Ax^{(k)} - b|| < 0.001,$$

$$x^* = [1\ 2\ -1]^T$$

Metody przestrzeni Kryłowa

- metoda gradientów sprzężonych (CG – Conjugate Gradient)
- uogólniona metoda najmniejszego residuum (GMRES – Generalized Minimum RESidual)
- i in. . . .

Metoda gradientów sprzężonych jako met. bezpośrednia

Niech $\mathbf{A}_{n\times n}$ będzie macierzą symetryczną, dodatnio określoną. Niech $\mathbf{x}^*$ będzie rozwiązaniem dokładnym układu

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \mathbf{b} \tag{13}$$

Wektory $\mathbf{u}$, $\mathbf{v}$ $(\mathbf{u}, \mathbf{v} \neq \mathbf{0}\ )$ są sprzężone (względem $\mathbf{A}$) jeśli

$$\mathbf{u}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{v} = \mathbf{0} \tag{14}$$

Dla $\mathbf{A}$ symetrycznej i dodatnio określonej, lewa strona definiuje iloczyn skalarny:

$$\langle \mathbf{u}, \mathbf{v}\rangle_{\mathbf{A}} := \langle \mathbf{A}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}, \mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{A}\mathbf{u}, \mathbf{v}\rangle = \langle \mathbf{u}, \mathbf{A}\mathbf{v}\rangle = \mathbf{u}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{v}$$

Więc, dwa wektory są sprzężone jeśli są ortogonalne względem tego iloczynu skalarnego.
Niech dany będzie zbiór n wzajemnie sprzężonych kierunków (wektorów) $\mathbf{w}_i$, $i = 1, 2, \ldots n$. Wtedy $\mathbf{w}_i$ tworzą bazę $\mathcal{R}^n$, więc

$$\mathbf{x}^* = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i \mathbf{w}_i \tag{15}$$

$\alpha_i =?$

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \mathbf{A}\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathbf{w}_i = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \mathbf{b} \qquad / \cdot \mathbf{w}_k^T \tag{16}$$

$$\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \tag{17}$$

$$\left\{\begin{array}{ccccccccccc} \alpha_1\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_1 & + & \alpha_2\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_2 & + & \alpha_3\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_3 & + & \dots & + & \alpha_n\mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_n & = & \mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \\ \alpha_1\mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_1 & + & \alpha_2\mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_2 & + & \alpha_3\mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_3 & + & \dots & + & \alpha_n\mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_n & = & \mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \\ \dots & & & & & & & & & & \\ \alpha_1\mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_1 & + & \alpha_2\mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_2 & + & \alpha_3\mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_3 & + & \dots & + & \alpha_n\mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_n & = & \mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \end{array}\right. \tag{18}$$

$$\alpha_i\mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \tag{19}$$

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{b}}{\mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_i} = \frac{\langle\mathbf{w}_i, \mathbf{b}\rangle}{\langle\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_i\rangle_{\mathbf{A}}} \tag{20}$$

Skąd wziąć wektory wzajmnie sprzężone? $\longrightarrow$ wektory własne

$$\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \mathbf{A}\sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathbf{w}_i = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \mathbf{b} \qquad / \cdot \mathbf{w}_k^T \tag{16}$$

$$\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x}^* = \sum_{i=1}^{n}\alpha_i\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \tag{17}$$

$$\left\{\begin{array}{ccccccccccc} \alpha_1\mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_1 & + & 0 & + & 0 & + & \dots & + & 0 & = & \mathbf{w}_1^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \\ 0 & + & \alpha_2\mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_2 & + & 0 & + & \dots & + & 0 & = & \mathbf{w}_2^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \\ \dots \\ 0 & + & 0 & + & 0 & + & \dots & + & \alpha_n\mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_n & = & \mathbf{w}_n^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \end{array}\right. \tag{18}$$

$$\alpha_i\mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_i = \mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{b} \tag{19}$$

$$\alpha_i = \frac{\mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{b}}{\mathbf{w}_i^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_i} = \frac{\langle\mathbf{w}_i, \mathbf{b}\rangle}{\langle\mathbf{w}_i, \mathbf{w}_i\rangle_{\mathbf{A}}} \tag{20}$$

Skąd wziąć wektory wzajmnie sprzężone? $\longrightarrow$ wektory własne

Iteracyjna metoda gradientów sprzężonych

$n \nearrow \Rightarrow$ koszt obliczenia wszystkich w.w. $\nearrow$
Odpowiedni wybór wektorów $\mathbf{w}_i \rightarrow$ CG w wersji iteracyjnej
Niech $\mathbf{x}_0 = \mathbf{0}$. Ponieważ $\mathbf{x}^*$ minimalizuje formę kwadratową:
$f(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \in \mathbf{R}^n$.
pierwszym wektorem bazowym $\mathbf{w}_1$ uczyńmy gradient f w kierunku $\mathbf{x}_0$ równy:

$$\nabla f = \mathbf{A}\mathbf{x}_0 - \mathbf{b} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{0} - \mathbf{b} = -\mathbf{b}$$

Pozostałe wektory w bazie będą sprzężone do gradientu.
Niech

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_k$$

$\mathbf{r}_k$ - residuum w k-tym kroku iteracji. A więc

$$\mathbf{r}_k = -\nabla f$$

Metoda gradientu prostego $\rightarrow$ ruch w kierunku $\mathbf{r}_k$.
Metoda gradientów sprzężonych $\rightarrow$ ruch w kierunku sprzężonym, najbliższym do $\mathbf{r}_k$

$$\mathbf{w}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \frac{\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{r}_k}{\mathbf{w}_k^{\mathrm{T}}\mathbf{A}\mathbf{w}_k}\mathbf{w}_k$$

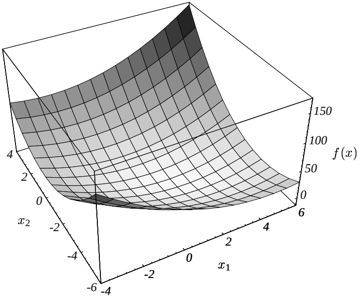
$$f(x) = \frac{1}{2}x^T A x - b^T x + c \quad (21)$$

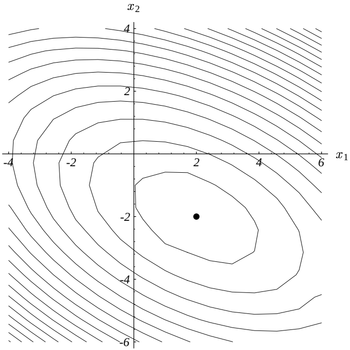
$$f'(x) = \begin{bmatrix} \frac{\delta}{\delta x_1} f(x) \\ \frac{\delta}{\delta x_2} f(x) \\ \vdots \\ \frac{\delta}{\delta x_n} f(x) \end{bmatrix} \quad (22)$$

$$f'(x) = \frac{1}{2}A^T x + \frac{1}{2}Ax - b \quad (23)$$

Jeśli A symetryczna, to:

$$f'(x) = Ax - b \quad (24)$$





$$w_{(0)} = r_{(0)} = b - Ax_{(0)} \tag{25}$$

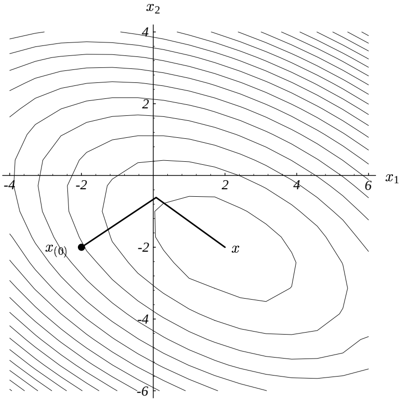
$$\alpha_{(i)} = \frac{r_{(i)}^T r_{(i)}}{w_{(i)}^T A w_{(i)}} \tag{26}$$

$$x_{(i+1)} = x_{(i)} + \alpha w_{(i)} \tag{27}$$

$$r_{(i+1)} = r_{(i)} - \alpha_{(i)} A w_{(i)} \tag{28}$$

$$\beta_{(i+1)} = \frac{r_{(i+1)}^T r_{(i+1)}}{r_{(i)}^T r_{(i)}} \tag{29}$$

$$w_{(i+1)} = r_{(i+1)} + \beta_{(i+1)} w_{(i)} \tag{30}$$

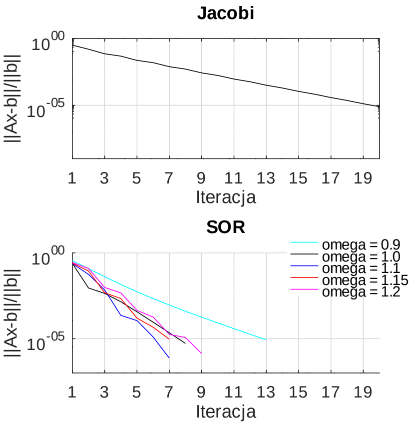


Dane: $\mathbf{A}$, $\mathbf{b}$, ϵ,N ;
Wyniki: $\mathbf{x}$

$\mathbf{k} \leftarrow length(b)$
$\mathbf{x} \leftarrow \mathbf{0}$
$\mathbf{r}_0 \leftarrow \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$
$\mathbf{w}_0 \leftarrow -\mathbf{r}_0$
$\alpha_k \leftarrow \frac{\mathbf{r}_0^T \mathbf{w}_0}{\mathbf{w}_0^T \mathbf{A} \mathbf{w}_0}$
$\mathbf{x}_0 \leftarrow \mathbf{x} + \alpha_0 \mathbf{w}$
for 1:k **do**
  $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{w}_k$
  if $||\mathbf{r}_{k+1}|| < \epsilon$ **then**
    break ;
  end if
  $\beta_k \leftarrow \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{A} \mathbf{w}_k}{\mathbf{w}_k^T \mathbf{A} \mathbf{w}_k}$
  $\mathbf{w}_{k+1} = -\mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{w}_k$
  $\alpha_k \leftarrow \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{w}_{k+1}}{\mathbf{w}_{k+1}^T \mathbf{A} \mathbf{w}_{k+1}}$
  $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{w}_k$
end for

```
function [x] = cg(A,b,epsi)

k = length(b);
x = zeros(n,1) ;

r = b - A*x;
w = -r ;

a = (r'*w)/(w'*A*w);
x = x0 + a*w;

   for i = 1:k
       r = r - a*A*w ;
       if( norm(r) < epsi )
           break;
       end
       B = (r'*A*w)/(w'*A*w);
       w = -r + B*w ;
       a = (r'*w)/(w'*A*w);
       x = x + a*w;
   end
end
```

$$A \begin{bmatrix} 14.5 & -3 & -1.5 & 5 \\ -3 & 5.5 & 2 & 0 \\ -1.5 & 2 & 10.5 & 0 \\ 5 & 0 & 0 & 12.5 \end{bmatrix} \times x \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = b \begin{bmatrix} -11 \\ 6.5 \\ -7 \\ 7.5 \end{bmatrix}$$



Dziękuję za uwagę