

1. Blok iterativne metode za linearne sustave

1.1. Ukratko o iterativnim metodama

Promatramo iterativne metode za rješavanje linearnog sustava $Ax = b$, gdje je A regularna matrica reda n . Takva metoda počinje s nekim početnim vektorom $x^{(0)}$, a zatim generira niz iteracija $x^{(m)}$, $m \in \mathbb{N}$, koji (nadamo se) konvergira prema “pravom” rješenju linearnog sustava $x = A^{-1}b$.

Standardne “jednokoračne” metode, ili metode prvog reda, nalaze sljedeću aproksimaciju $x^{(m+1)}$ iz jednog prethodnog vektora $x^{(m)}$ (a ne više njih), eventualno koristeći jedan “međukorak” i popravak iteracije u odgovarajućem smjeru.

Najjednostavniji oblik iterativnih metoda dobivamo **rastavom** matrice A na par matrica (M, K) (obje reda n) za koje vrijedi

- (a) $A = M - K$,
- (b) M je regularna.

Bilo koji takav rastav matrice A generira iterativnu metodu na sljedeći način:

$$Ax = Mx - Kx = b \implies Mx = Kx + b,$$

pa zbog regularnosti od M izlazi

$$x = M^{-1}Kx + M^{-1}b.$$

Ako označimo $R = M^{-1}K$, $c = M^{-1}b$, onda je prethodna relacija ekvivalentna s

$$x = Rx + c.$$

Iz ove relacije odmah možemo definirati iterativnu metodu oblika “jednostavne” iteracije

$$x^{(m+1)} = Rx^{(m)} + c, \quad m \in \mathbb{N}_0. \tag{1.1.1}$$

Pravo rješenje x sustava $Ax = b$ je fiksna točka iteracijske funkcije (1.1.1), tj. fiksna točka preslikavanja

$$f(x) = Rx + c.$$

Drugi standardni oblik iterativnih metoda interpretira novu iteraciju kao korekciju prethodne, preko **reziduala** prethodne iteracije. Rezidual prethodne iteracije $x^{(m)}$ je

$$r^{(m)} := b - Ax^{(m)}.$$

Korekcija ili nova iteracija ima oblik

$$x^{(m+1)} = x^{(m)} + M^{-1}r^{(m)} = x^{(m)} + M^{-1}(b - Ax^{(m)}), \quad m \in \mathbb{N}_0, \quad (1.1.2)$$

gdje je M neka regularna matrica koja se jednostavno invertira, s idejom da je M dobra aproksimacija za A , tj. da je $M^{-1}A$ “blizu” jedinične matrice I . Takvu matricu M zovemo “predkondicioniranje” za sustav $Ax = b$ (engl. “preconditioner”).

Kad bismo uzeli $M = A$, tj. $M^{-1}A = I$, onda iz (1.1.2) dobivamo

$$x^{(m+1)} = x^{(m)} + A^{-1}(b - Ax^{(m)}) = x^{(m)} + A^{-1}b - A^{-1}Ax^{(m)} = A^{-1}b,$$

što je pravo rješenje sustava $Ax = b$. Naravno, u praksi to ne ide, jer se A teško invertira. Upravo zato i koristimo iterativne metode u kojima je M neka dobra aproksimacija za A koja se lako invertira.

Matrica M u (1.1.2) je **ista** matrica M kao u rastavu matrice $A = M - K$, koji generira iteraciju (1.1.1). Zato i koristimo istu oznaku M . Naime, relaciju (1.1.2) možemo napisati u obliku

$$x^{(m+1)} = (I - M^{-1}A)x^{(m)} + M^{-1}b.$$

S druge strane, kad u (1.1.1) uvrstimo oznake $R = M^{-1}K$, $c = M^{-1}b$, i još iskoristimo $K = M - A$ iz rastava matrice A , dobivamo

$$\begin{aligned} x^{(m+1)} &= M^{-1}Kx^{(m)} + M^{-1}b = M^{-1}(M - A)x^{(m)} + M^{-1}b \\ &= (I - M^{-1}A)x^{(m)} + M^{-1}b. \end{aligned}$$

Dakle, matrica M ima isto značenje u obje formulacije!

Zbog linearnosti problema $Ax = b$, oba oblika iterativnih metoda imaju još jednostavniji zapis u terminu **greške**. Greška m -te iteracije je

$$e^{(m)} := x - x^{(m)} = A^{-1}b - x^{(m)}.$$

Iz prvog oblika iteracije (1.1.1), koristeći $x = Rx + c$, dobivamo vezu grešaka susjednih iteracija

$$x - x^{(m+1)} = (Rx + c) - (Rx^{(m)} + c) = R(x - x^{(m)}),$$

odakle odmah slijedi

$$e^{(m+1)} = Re^{(m)}. \quad (1.1.3)$$

Analogno, iz drugog oblika (1.1.2) dobivamo

$$\begin{aligned} x - x^{(m+1)} &= x - [x^{(m)} + M^{-1}(b - Ax^{(m)})] = x - x^{(m)} - M^{-1}(Ax - Ax^{(m)}) \\ &= x - x^{(m)} - M^{-1}A(x - x^{(m)}), \end{aligned}$$

odakle slijedi

$$e^{(m+1)} = (I - M^{-1}A)e^{(m)}. \quad (1.1.4)$$

Ako želimo da greška $e^{(m)}$ teži prema nuli kad $m \rightarrow \infty$, iz zapisa (1.1.3) i (1.1.4) odmah se vidi da odgovarajuće matrice iteracija R , odnosno, $I - M^{-1}A$, moraju biti “kontrakcije”, tj. njihov spektralni radijus mora biti strogo manji od 1.

Iz definicijskih relacija za rezidual i grešku m -te iteracije

$$r^{(m)} := b - Ax^{(m)}, \quad e^{(m)} := x - x^{(m)} = A^{-1}b - x^{(m)},$$

odmah vidimo da je

$$r^{(m)} = Ae^{(m)}, \quad e^{(m)} = A^{-1}r^{(m)},$$

tj. prava greška $e^{(m)}$ (koju ne znamo!) je rješenje linearnog sustava $Ae^{(m)} = r^{(m)}$. Desna strana ovog sustava je rezidual trenutne iteracije $r^{(m)}$, a ne b . Vektor $r^{(m)}$ se može izračunati iz trenutne aproksimacije $x^{(m)}$.

U praksi se metoda jednostavne iteracije za linearne sustave dosta često realizira u sljedećem obliku, preko reziduala i korekcije.

Algoritam 1.1.1. (Jednostavna iteracija) *Neka je M izabrana matrica predkondicioniranja za A i neka je $x^{(0)}$ početna aproksimacija rješenja sustava $Ax = b$.*

za $m = 0, 1, \dots$, ponavljaj
 izračunaj rezidual $r^{(m)} = b - Ax^{(m)}$;
 riješi sustav $Me^{(m)} = r^{(m)}$;
 korigiraj aproksimaciju $x^{(m+1)} = x^{(m)} + e^{(m)}$;

■

Ponovimo još standardne iterativne metode. Njih dobivamo iz rastava matrice A oblika

$$A = D - \tilde{L} - \tilde{U},$$

gdje je D dijagonalna matrica koja sadrži dijagonalu od A , $-\tilde{L}$ je strogo donja trokutasta matrica koja sadrži strogo donji trokut od A , a $-\tilde{U}$ je strogo gornja trokutasta matrica koja sadrži strogo gornji trokut od A .

U Jacobijevoj iterativnoj metodi matrica predkondicioniranja M sadrži samo dijagonalu od A , tj. vrijedi $M_{Jac} = D$, $K_{Jac} = \tilde{L} + \tilde{U}$. Veza nove i stare iteracije je

$$Dx^{(m+1)} = (\tilde{L} + \tilde{U})x^{(m)} + b.$$

Odavde dobivamo

$$R_{Jac} = D^{-1}(\tilde{L} + \tilde{U}), \quad c_{Jac} = D^{-1}b.$$

Za komponente vektora $x^{(m+1)}$ nove iteracije vrijedi relacija

$$x_j^{(m+1)} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n a_{jk} x_k^{(m)} \right), \quad j = 1, \dots, n. \quad (1.1.5)$$

Neformalno rečeno, u Jacobijevoj metodi očekujemo da je A “skoro dijagonalna”, tj. da je D^{-1} dobra aproksimacija za A^{-1} .

U Gauss–Seidelovoj iterativnoj metodi matrica M sadrži cijeli donji trokut od A , tako da je $M_{GS} = D - \tilde{L}$, $K_{GS} = \tilde{U}$. Veza nove i stare iteracije je

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

Odavde dobivamo

$$R_{GS} = (D - \tilde{L})^{-1}\tilde{U}, \quad c_{GS} = (D - \tilde{L})^{-1}b.$$

Za komponente vektora $x^{(m+1)}$ nove iteracije vrijedi relacija

$$x_j^{(m+1)} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk} x_k^{(m+1)} - \sum_{k=j+1}^n a_{jk} x_k^{(m)} \right), \quad j = 1, \dots, n. \quad (1.1.6)$$

Neformalno rečeno, u Gauss–Seidelovoj metodi očekujemo da je A “skoro donja trokutasta”, tj. da je $(D - \tilde{L})^{-1}$ dobra aproksimacija za A^{-1} .

U $SOR(\omega)$ iterativnoj metodi s parametrom ω uzimamo $M_{SOR} = \omega^{-1}D - \tilde{L}$. Veza nove i stare iteracije je

$$\left(\frac{1}{\omega} D - \tilde{L} \right) x^{(m+1)} = \left(\frac{1-\omega}{\omega} D + \tilde{U} \right) x^{(m)} + b.$$

Odavde dobivamo

$$R_{SOR(\omega)} = \left(\frac{1}{\omega} D - \tilde{L} \right)^{-1} \left(\frac{1-\omega}{\omega} D + \tilde{U} \right),$$

$$c_{SOR(\omega)} = \left(\frac{1}{\omega} D - \tilde{L} \right)^{-1} b.$$

Za komponente vektora $x^{(m+1)}$ nove iteracije vrijedi relacija

$$x_j^{(m+1)} = (1-\omega)x_j^{(m)} + \frac{\omega}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} a_{jk} x_k^{(m+1)} - \sum_{k=j+1}^n a_{jk} x_k^{(m)} \right), \quad j = 1, \dots, n. \quad (1.1.7)$$

1.2. Blok iterativne metode

Pretpostavimo da je matrica A reda n particionirana na blokove na sljedeći način

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & A_{NN} \end{bmatrix},$$

gdje su dijagonalni blokovi A_{jj} kvadratne matrice reda n_j , za $j = 1, \dots, N$. Na isti način particioniramo vektor nepoznanica x i vektor desne strane b

$$x = (x_1, \dots, x_N)^T, \quad b = (b_1, \dots, b_N)^T,$$

gdje su x_j i b_j vektori duljine n_j .

Ako su dijagonalni blokovi A_{jj} regularne matrice, onda možemo definirati blok iterativne metode. Njih dobivamo tako da umjesto elemenata uvrstimo odgovarajuće blokove u relacije za standardne iterativne metode.

U blok Jacobijevoj iterativnoj metodi matrica M sadrži samo dijagonalne blokove od A . Za blok komponente vektora $x^{(m+1)}$ vrijedi

$$x_j^{(m+1)} = A_{jj}^{-1} \left(b_j - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N A_{jk} x_k^{(m)} \right), \quad j = 1, \dots, N. \quad (1.2.1)$$

U praksi se rijetko eksplicitno računa inverz A_{jj}^{-1} , već se gornje relacije svode na rješavanje linearnog sustava s matricom A_{jj} , reda n_j . Neformalno rečeno, u blok Jacobijevoj metodi očekujemo da je A “skoro blok dijagonalna”.

U blok Gauss–Seidelovoj iterativnoj metodi matrica M sadrži cijeli blok donji trokut od A , zajedno s dijagonalnim blokovima. Za blok komponente vektora $x^{(m+1)}$ vrijedi

$$x_j^{(m+1)} = A_{jj}^{-1} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} x_k^{(m+1)} - \sum_{k=j+1}^N A_{jk} x_k^{(m)} \right), \quad j = 1, \dots, N. \quad (1.2.2)$$

Neformalno rečeno, u blok Gauss–Seidelovoj metodi očekujemo da je A “skoro blok donja trokutasta”.

U blok SOR(ω) iterativnoj metodi s parametrom ω za blok komponente vektora $x^{(m+1)}$ vrijedi

$$x_j^{(m+1)} = (1 - \omega)x_j^{(m)} + \omega A_{jj}^{-1} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} x_k^{(m+1)} - \sum_{k=j+1}^N A_{jk} x_k^{(m)} \right), \quad j = 1, \dots, N. \quad (1.2.3)$$

U primjenama blok iterativnih metoda standardno se koristi oznaka $D_j := A_{jj}$ za dijagonalne blokove matrice A , tako da particija matrice A ima oblik

$$A = \begin{bmatrix} D_1 & A_{12} & \cdots & A_{1N} \\ A_{21} & D_2 & \cdots & A_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{N1} & A_{N2} & \cdots & D_N \end{bmatrix}.$$

Za standardne blok iterativne metode blokovi D_j moraju biti regularne matrice. Onda linearni sustavi za blok komponente $x_j^{(m+1)}$ u relacijama (1.2.1)–(1.2.3) uvijek imaju jedinstveno rješenje.

Već smo rekli da u blok Jacobijevoj iterativnoj metodi matrica predkondicioniranja M sadrži samo dijagonalne blokove od A . U ovim oznakama je

$$D_A := M_{BJac} = \text{diag}(D_1, D_2, \dots, D_N).$$

Matrica iteracije $B := R_{BJac}$ u blok Jacobijevoj metodi onda ima oblik

$$B := R_{BJac} = I - M_{BJac}^{-1}A = I - D_A^{-1}A.$$

Ako su svi dijagonalni blokovi D_j u matrici A baš dijagonalne matrice, onda **nema** razlike između običnih “točkovnih” (ili komponentnih) iterativnih metoda definiranih relacijama (1.1.5)–(1.1.7) i odgovarajućih blok varijanti (1.2.1)–(1.2.3). Bez obzira na dimenzije dijagonalnih blokova (tj. i za $n_j > 1$), obična i blok metoda generiraju **iste** vektore $x^{(m+1)}$.

Razlike između običnih i blok metoda nastaju tek kad dijagonalni blokovi D_j nisu (svi) dijagonalni. Ilustrirajmo to na primjeru diskretizacije Poissonove jednadžbe na jediničnom kvadratu, uz pretpostavku da koristimo standardnu ekvidistantnu diskretizaciju s 5 točaka.

Sve standardne numeracije čvorova vode na linearni sustav s blok tridijagonalnom matricom oblika

$$A = \begin{bmatrix} D_1 & U_1 & & & \\ L_1 & D_2 & U_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & L_{m-2} & D_{m-1} & U_{m-1} \\ & & & L_{m-1} & D_m \end{bmatrix}, \quad (1.2.4)$$

gdje su D_j , $j = 1, \dots, m$, regularne matrice. Kod diskretne Poissonove jednadžbe dodatno još znamo da je A simetrična i pozitivno definitna, tako da je $U_j = L_j^T$, za $j = 1, \dots, m$. Detaljnija struktura matrice A ovisi o izboru numeracije.

Matrice A oblika (1.2.4) imaju svojstvo (A^π) i za njih vrijede svi rezultati o optimalnom izboru parametra ω za $SOR(\omega)$ metodu po komponentama. Zanimljivo je da ti rezultati vrijede i za **blok** varijantu SOR metode, s tim da za osnovnu matricu treba uzeti matricu iteracije B iz blok Jacobijeve metode.

Teorem 1.2.1. *Pretpostavimo da matrica A ima svojstvo (A^π) (što znači da A ima i konzistentan poredak) i da matrica iteracije $B := R_{BJac}$ u blok Jacobijevoj metodi ima samo realne svojstvene vrijednosti.*

Onda blok $SOR(\omega)$ metoda konvergira za bilo koji početni vektor ako i samo ako je $\mu := \rho(B) < 1$ (tj. blok Jacobijeva metoda konvergira) i vrijedi $0 < \omega < 2$. Dodatno, za $\mu < 1$ onda vrijedi i

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}},$$

$$\rho(R_{BSOR(\omega_{\text{opt}})}) = \omega_{\text{opt}} - 1 = \frac{\mu^2}{(1 + \sqrt{1 - \mu^2})^2} = \frac{1 - \sqrt{1 - \mu^2}}{1 + \sqrt{1 - \mu^2}},$$

a za sve $\omega \in (0, 2)$ vrijedi

$$\rho(R_{BSOR(\omega)}) = \begin{cases} 1 - \omega + \frac{1}{2}\omega^2\mu^2 + \omega\mu\sqrt{1 - \omega + \frac{1}{4}\omega^2\mu^2}, & \text{za } 0 < \omega \leq \omega_{\text{opt}}, \\ \omega - 1, & \text{za } \omega_{\text{opt}} \leq \omega \leq 2. \end{cases}$$

Slično kao i u komponentnom slučaju, pretpostavke prethodnog teorema su sigurno ispunjene za simetrične pozitivno definitne matrice A , s tim da treba dodati zahtjev da su i dijagonalni blokovi pozitivno definitni (u komponentnom slučaju, pozitivnost dijagonalnih elemenata slijedi direktno iz pozitivne definitnosti matrice A).

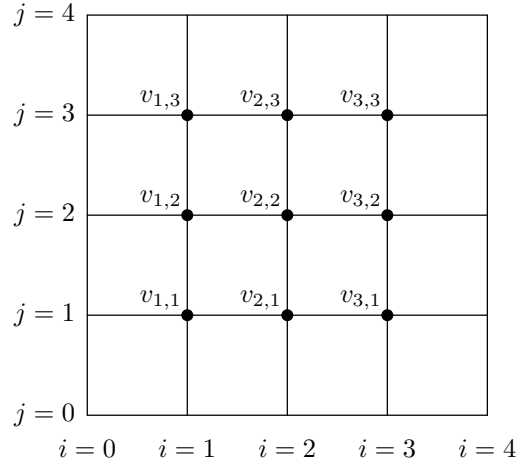
Teorem 1.2.2. *Ako su A i D_A simetrične i pozitivno definitne matrice i ako A ima svojstvo (A^π), onda matrica iteracije B u blok Jacobijevoj metodi ima samo realne svojstvene vrijednosti i vrijedi $\mu := \rho(B) < 1$.*

To znači da blok Jacobijeva metoda sigurno konvergira. Po prvom teoremu, to onda vrijedi i za blok $SOR(\omega)$ metodu za $0 < \omega < 2$, s tim da znamo i optimalni izbor parametra ω .

Vratimo se sad matricama koje nastaju diskretizacijom Poissonove jednadžbe na jediničnom kvadratu. Pretpostavljamo da je korak diskretizacije u oba smjera jednak $h = 1/(N + 1)$, tako da imamo ukupno $N \times N$ unutarnjih čvorova (s nepoznatim vrijednostima), a dobivena matrica A je reda $n = N \times N$.

Primjer takve diskretizacije za $N = 3$ dan je na sljedećoj slici, s tim da su unutarnji čvorovi $v_{i,j}$ označeni s dva indeksa, prema koordinatama (ih, jh) u

diskretizaciji.

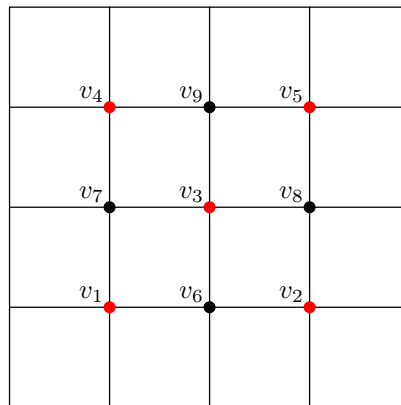


Ako koristimo “crveno–crnu” numeraciju čvorova, dobivamo matricu A oblika (1.2.4) sa samo $m = 2$ dijagonalna bloka

$$A = \begin{bmatrix} D_1 & L_1^T \\ L_1 & D_2 \end{bmatrix}.$$

Svaki dijagonalni blok odgovara čvorovima iste boje i lako se vidi da su oba bloka D_1 i D_2 baš dijagonalne matrice.

Na primjer, za $N = 3$, crveno–crni poredak



daje matricu

$$A = \begin{bmatrix} 4 & -1 & -1 & & & & & \\ -1 & 4 & & -1 & -1 & & & \\ -1 & & 4 & & -1 & -1 & & \\ & -1 & & 4 & & & -1 & \\ & -1 & -1 & & 4 & & -1 & -1 \\ & & -1 & & & 4 & & -1 \\ & & & -1 & -1 & & 4 & -1 \\ & & & & -1 & -1 & & 4 \end{bmatrix}.$$

U oba slučaja, dijagonalni blokovi matrice A su skalarne dijagonalne matrice, $D_j = 4I_{n_j}$, za odgovarajuće redove n_j . Zato nema razlike između komponentnih i blok iterativnih metoda. Iz istog razloga, lako se vidi da standardne iterativne metode imaju potpuno ista svojstva za obje ove numeracije.

Već smo ranije pokazali da za običnu Jacobijevu metodu vrijedi

$$\rho(R_{Jac}) = \cos \frac{\pi}{N+1} = \cos \pi h.$$

Kad N raste, tj. kad korak h pada prema nuli, vidimo da $\rho(R_{Jac})$ teži prema 1, i tada vrijedi

$$\rho(R_{Jac}) = \cos \pi h \approx 1 - \frac{1}{2}(\pi h)^2, \quad (1.2.5)$$

s greškom $O(h^4)$. Za Gauss–Seidelovu metodu znamo da je

$$\rho(R_{GS}) = (\rho(R_{Jac}))^2 = \cos^2 \frac{\pi}{N+1} = \cos^2 \pi h,$$

pa za velike N dobivamo

$$\rho(R_{GS}) = \cos^2 \pi h \approx 1 - (\pi h)^2. \quad (1.2.6)$$

Konačno, koristeći prethodne teoreme, za običnu $SOR(\omega)$ dobivamo optimalni izbor parametra

$$\omega_{opt} = \frac{2}{1 + \sin \frac{\pi}{N+1}} = \frac{2}{1 + \sin \pi h},$$

a pripadni (najmanji) spektralni radijus je

$$\rho(R_{SOR(\omega_{opt})}) = \omega_{opt} - 1 = \frac{1 - \sin \frac{\pi}{N+1}}{1 + \sin \frac{\pi}{N+1}} = \frac{1 - \sin \pi h}{1 + \sin \pi h}.$$

Za velike N je

$$\omega_{\text{opt}} = \frac{2}{1 + \sin \pi h} \approx 2(1 - \pi h) \quad (1.2.7)$$

i

$$\rho(R_{\text{SOR}(\omega_{\text{opt}})}) = \omega_{\text{opt}} - 1 \approx 1 - 2\pi h. \quad (1.2.8)$$

Spektralni radijus kod Jacobijeve metode i kod Gauss–Seidelove metode ima oblik $1 - O(h^2)$, dok kod SOR metode s optimalnim parametrom spektralni radijus ima oblik $1 - O(h)$, što pokazuje da je $\text{SOR}(\omega_{\text{opt}})$ reda veličine N puta brži i od Jacobijeve i od Gauss–Seidelove metode.

Ako čvorove numeriramo “prirodno”, tj. sekvencijalno po stupcima (ili, po redcima), uvijek u istom smjeru — recimo, odozdo nagore (ili, slijeva udesno), dobivamo matricu A oblika (1.2.4) s $m = N$ dijagonalnih blokova. Svi blokovi su kvadratne matrice istog reda $n_j = N$, za $j = 1, \dots, N$.

Za razliku od ranije, svi dijagonalni blokovi D_j su simetrične tridijagonalne matrice reda N , oblika

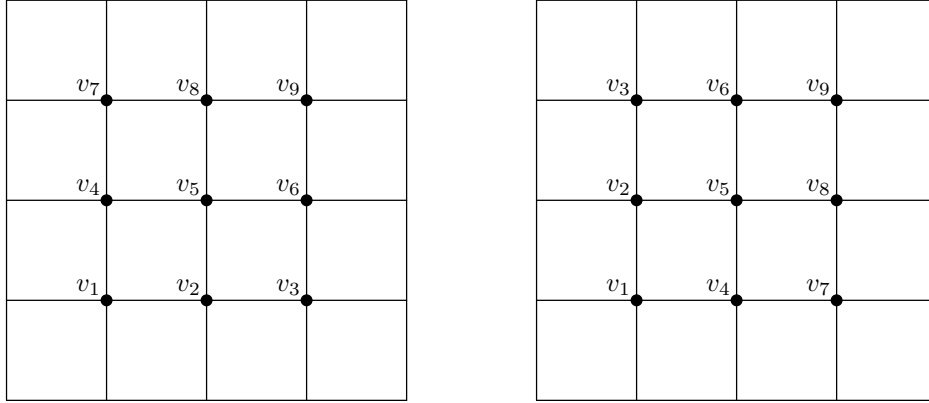
$$S_N := D_j = \begin{bmatrix} 4 & -1 & & & \\ -1 & 4 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -1 & 4 & -1 \\ & & & -1 & 4 \end{bmatrix},$$

a izvandijagonalni blokovi su $L_j = U_j = -I_N$, tj. negativne jedinične matrice reda N , za $j = 1, \dots, N$.

Za dani N , pripadna matrica A dobivena prirodnom numeracijom čvorova ima oblik

$$A = \begin{bmatrix} S_N & -I_N & & & \\ -I_N & S_N & -I_N & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & -I_N & S_N & -I_N \\ & & & -I_N & S_N \end{bmatrix}. \quad (1.2.9)$$

Na primjer, za $N = 3$, prirodne numeracije po recima ili stupcima



daju matricu

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

Za matrice A oblika (1.2.9) možemo koristiti obične komponentne iterativne metode, prebacivanjem u neki konzistentan poredak. Svojstva konvergencije ovih metoda su ista kao i ranije.

Međutim, ovdje možemo koristiti i blok iterativne metode, koje sad generiraju drugačiji niz vektora i imaju drugačija svojstva konvergencije od komponentnih metoda.

U blok Jacobijevoj iterativnoj metodi za matricu A iz (1.2.9), matrica predkondicioniranja M sadrži samo dijagonalne blokove od A , pa je

$$D_A = M_{BJac} = \text{diag}(S_N, S_N, \dots, S_N).$$

Pripadna matrica iteracije u blok Jacobijevoj metodi je $B := R_{BJac} = I - D_A^{-1}A$ i

ima oblik

$$B = \begin{bmatrix} 0 & S_N^{-1} & & & \\ S_N^{-1} & 0 & S_N^{-1} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & S_N^{-1} & 0 & S_N^{-1} \\ & & & S_N^{-1} & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.2.10)$$

Ovu matricu možemo napisati preko Kroneckerovog produkta

$$B = U_N \otimes S_N^{-1}, \quad (1.2.11)$$

gdje je U_N standardna tridijagonalna matrica za Čebiševljeve polinome (prve i) druge vrste

$$U_N := \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ 1 & 0 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 0 & 1 \\ & & & 1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.2.12)$$

Iz ovog zapisa lako se nalaze sve svojstvene vrijednosti matrice B iz (1.2.10), a zatim i njezin spektralni radijus $\mu_B := \rho(B)$.

U tu svrhu koristimo sljedeći teorem o svojstvenim vrijednostima i vektorima Kroneckerovog produkta matrica.

Teorem 1.2.3. *Neka su F i G bilo koje dvije kvadratne matrice koje se mogu dijagonalizirati, s tim da je F reda m , a G reda n . Neka je $Fx_j = \alpha_j x_j$, za $j = 1, \dots, m$, gdje su α_j svojstvene vrijednosti matrice F , a x_1, \dots, x_m je baza svojstvenih vektora za F . Analogno, neka je $Gy_k = \beta_k y_k$, za $k = 1, \dots, n$, gdje su β_k svojstvene vrijednosti matrice G , a y_1, \dots, y_n je baza svojstvenih vektora za G .*

Kroneckerov produkt ovih matrica je matrica reda mn s blok zapisom

$$F \otimes G = \begin{bmatrix} f_{11} \cdot G & f_{12} \cdot G & \cdots & f_{1m} \cdot G \\ f_{21} \cdot G & f_{22} \cdot G & \cdots & f_{2m} \cdot G \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{m1} \cdot G & f_{m2} \cdot G & \cdots & f_{mm} \cdot G \end{bmatrix},$$

koja se, također, može dijagonalizirati. Svojstvene vrijednosti ove matrice su

$$\lambda_{jk} = \alpha_j \cdot \beta_k, \quad j = 1, \dots, m, \quad k = 1, \dots, n,$$

a pripadni svojstveni vektori imaju oblik $z_{jk} = x_j \otimes y_k$, tj. po komponentama vrijedi

$$(z_{jk})_{(p-1)n+q} = (x_j)_p \cdot (y_k)_q, \quad p = 1, \dots, m, \quad q = 1, \dots, n.$$

Ovaj teorem možemo primijeniti na zapis (1.2.11) matrice B , s tim da je kod nas $m = n = N$. Svojstvene vrijednosti matrice B su

$$\lambda_{jk}(B) = \lambda_j(U_N) \cdot \lambda_k(S_N^{-1}), \quad j, k = 1, \dots, N,$$

gdje su $\lambda_j(U_N)$ svojstvene vrijednosti matrice U_N , a $\lambda_k(S_N^{-1})$ svojstvene vrijednosti matrice S_N^{-1} .

Još trebamo naći svojstvene vrijednosti matrica U_N i S_N^{-1} . No, to nije veći problem. Svojstvene vrijednosti matrice U_N iz (1.2.12) smo već izračunali kod analize svojstava matrice T_N koja nastaje diskretizacijom Poissonove jednadžbe u jednoj dimenziji. Tamo smo pokazali da je

$$\lambda_j(U_N) = 2 \cos \frac{j\pi}{N+1}, \quad j = 1, \dots, N.$$

Primijetimo da je $S_N = 4I_N - U_N$, pa je $S_N^{-1} = (4I_N - U_N)^{-1}$. Neka je f funkcija definirana s $f(z) = 1/(4 - z)$. Očito je f analitička u okolini spektra matrice U_N (sve svojstvene vrijednosti od U_N su realne i manje od 2, a točka $z_0 = 4$ je jedini pol funkcije f). Onda vrijedi

$$\lambda_k(S_N^{-1}) = \lambda_k(f(U_N)) = f(\lambda_k(U_N)),$$

pa je

$$\lambda_k(S_N^{-1}) = \frac{1}{4 - 2 \cos \frac{k\pi}{N+1}}, \quad k = 1, \dots, N.$$

Zaključujemo da je

$$\lambda_{jk}(B) = \frac{2 \cos \frac{j\pi}{N+1}}{4 - 2 \cos \frac{k\pi}{N+1}} = \frac{\cos \frac{j\pi}{N+1}}{2 - \cos \frac{k\pi}{N+1}}, \quad j, k = 1, \dots, N.$$

Na kraju, za spektralni radijus $\mu_B := \rho(B)$ vrijedi

$$\mu_B := \rho(B) = \max_{j,k} |\lambda_{jk}(B)|, \quad j, k = 1, \dots, N.$$

Za maksimizaciju brojnika treba uzeti $j = 1$, a za minimizaciju nazivnika treba uzeti $k = 1$, pa je

$$\mu_B := \rho(B) = \frac{\cos \frac{\pi}{N+1}}{2 - \cos \frac{\pi}{N+1}}.$$

Kad još uvrstimo korak diskretizacije $h = 1/(N+1)$, dobivamo da za blok Jacobijevu iterativnu metodu vrijedi

$$\mu_B := \rho(B) = \frac{\cos \frac{\pi}{N+1}}{2 - \cos \frac{\pi}{N+1}} = \frac{\cos \pi h}{2 - \cos \pi h}.$$

Pogledajmo što se događa kad N raste, tj. kad korak h pada prema nuli. Kao i ranije, možemo uzeti

$$\cos \pi h = 1 - \frac{1}{2}(\pi h)^2 + O(h^4).$$

S prva dva člana ovog razvoja izlazi

$$\frac{\cos \pi h}{2 - \cos \pi h} \approx \frac{1 - \frac{1}{2}(\pi h)^2}{2 - (1 - \frac{1}{2}(\pi h)^2)} = \frac{1 - \frac{1}{2}(\pi h)^2}{1 + \frac{1}{2}(\pi h)^2} \approx \left(1 - \frac{1}{2}(\pi h)^2\right)^2 \approx 1 - (\pi h)^2,$$

tako da je

$$\mu_B = \frac{\cos \pi h}{2 - \cos \pi h} \approx 1 - (\pi h)^2, \quad (1.2.13)$$

s greškom $O(h^4)$.

Usporedbom s (1.2.6), vidimo da, za isti korak h , blok Jacobijeva metoda za A konvergira podjednako brzo kao i obična Gauss-Seidelova metoda za ranije matrice, tj. dvostruko **brže** od obične Jacobijeve metode za ranije matrice. Uočite da ranije matrice možemo napisati u obliku PAP^T , gdje je P odgovarajuća matrica permutacije za pripadnu renumeraciju čvorova.

Razlog za ovo “ubrzanje” leži u činjenici da **blok** dijagonala M_{BJac} od A bolje aproksimira matricu A , nego što “obična” komponentna dijagonala M_{Jac} aproksimira ranije matrice PAP^T , jer blok dijagonala sadrži još i dvije sporedne dijagonale.

Za blok Gauss–Seidelovu metodu znamo da je

$$\rho(R_{BGS}) = (\mu_B)^2 = \left(\frac{\cos \pi h}{2 - \cos \pi h}\right)^2,$$

pa za velike N dobivamo

$$\rho(R_{BGS}) = \left(\frac{\cos \pi h}{2 - \cos \pi h}\right)^2 \approx (1 - (\pi h)^2)^2 \approx 1 - 2(\pi h)^2, \quad (1.2.14)$$

što je opet dvostruko brže od obične Gauss-Seidelove metode za ranije matrice.

Za blok SOR(ω) metodu, iz prethodnih teorema dobivamo optimalni izbor parametra i pripadni (najmanji) spektralni radijus

$$\omega_{\text{Bopt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu_B^2}}, \quad \rho(R_{BSOR(\omega_{\text{Bopt}})}) = \omega_{\text{Bopt}} - 1.$$

Za velike N je

$$\sqrt{1 - \mu_B^2} \approx \sqrt{1 - (1 - 2(\pi h)^2)} = \sqrt{2} \pi h,$$

tako da je

$$\omega_{\text{Bopt}} = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \mu_B^2}} \approx \frac{2}{1 + \sqrt{2} \pi h} \approx 2(1 - \sqrt{2} \pi h) \quad (1.2.15)$$

i

$$\rho(R_{BSOR(\omega_{\text{Bopt}})}) = \omega_{\text{Bopt}} - 1 \approx 1 - 2\sqrt{2}\pi h. \quad (1.2.16)$$

Kad ove rezultate za blok metode usporedimo s relacijama (1.2.5)–(1.2.8) za komponentne iterativne metode, lako se vidi da relacije (1.2.13)–(1.2.16) možemo dobiti tako da u rezultate za komponentne metode, umjesto πh , stavimo $\sqrt{2}\pi h$.

To znači blok iterativne metode s finijom diskretizacijom h daju približnu istu brzinu konvergencije kao i komponentne metode s grubljom diskretizacijom $\sqrt{2}h$. Finija diskretizacija ima ukupno dvostruko više čvorova od grublje.

Na kraju, usporedimo još i složenost (broj aritmetičkih operacija) kod komponentnih i blok iterativnih metoda, za istu veličinu matrice A , tj. uz isti korak diskretizacije h , ako se matrica A dobiva diskretizacijom Poissonove jednadžbe na jediničnom kvadratu.

U standardnim komponentnim iterativnim metodama — Jacobijevoj, Gauss–Seidelovoj i $\text{SOR}(\omega)$ metodi, za pojedinačne skalarne komponente novog vektora $x^{(m+1)}$ vrijede relacije (1.1.5)–(1.1.7). Te relacije su redom

$$x_j^{(m+1)} = \frac{1}{a_{jj}} \left(b_j - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^n a_{jk} x_k^{(m)} \right),$$

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

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

za $j = 1, \dots, n$.

Ako je A puna matrica, s reda veličine n elemenata različitih od nule u svakom retku, onda računanje svake komponente zahtijeva $O(n)$ aritmetičkih operacija. Ukupno, za svaku novu iteraciju $x^{(m+1)}$ trebamo reda veličine $O(n^2)$ operacija. To odgovara jednom množenju matrice reda n i vektora duljine n . Zato se iterativne metode za pune matrice isplate, u usporedbi s direktnim metodama, samo ako je broj iteracija bitno manji od n .

Ako je A šuplja matrica s konstantnim brojem elemenata različitih od nule u svakom retku, onda računanje svake komponente zahtijeva konstantan broj operacija. Za svaku novu iteraciju $x^{(m+1)}$ onda trebamo reda veličine $O(n)$ operacija.

Na primjer, kod standardne diskretizacije s 5 točaka za Poissonovu jednadžbu na kvadratu, matrica A ima najviše 5 elemenata različitih od nule u svakom retku, pa računanje svake iteracije traje **linearno** u n . Slično vrijedi i za drugačije diskretizacije. Napomenimo da to **nije** optimalno za rješenje cijelog problema (kao kod Multigrid metode), jer broj potrebnih iteracija, također, ovisi o n .

U standardnim blok iterativnim metodama — blok Jacobijevoj, blok Gauss–Seidelovoj i blok SOR(ω) metodi, za blok komponente novog vektora $x^{(m+1)}$ vrijede relacije (1.2.1)–(1.2.3). Te relacije su redom

$$\begin{aligned}x_j^{(m+1)} &= A_{jj}^{-1} \left(b_j - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^N A_{jk} x_k^{(m)} \right), \\x_j^{(m+1)} &= A_{jj}^{-1} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} x_k^{(m+1)} - \sum_{k=j+1}^N A_{jk} x_k^{(m)} \right), \\x_j^{(m+1)} &= (1 - \omega) x_j^{(m)} + \omega A_{jj}^{-1} \left(b_j - \sum_{k=1}^{j-1} A_{jk} x_k^{(m+1)} - \sum_{k=j+1}^N A_{jk} x_k^{(m)} \right),\end{aligned}$$

za $j = 1, \dots, N$, s tim da svaka pojedina blok komponenta $x_j^{(m+1)}$ ima n_j elemenata. Ovdje je A_{jj} kvadratna matrica reda n_j , a A_{jk} je pravokutna matrica tipa $n_j \times n_k$, uz

$$\sum_{j=1}^N n_j = n.$$

Najveći dio posla u gornjim relacijama otpada na realizaciju operacije $A_{jj}^{-1} b_j^{(m)}$, gdje je $b_j^{(m)}$ odgovarajući vektor u velikim zagradama, kojeg svaki puta treba nanovo izračunati, jer ovisi o trenutnoj iteraciji.

Pretpostavimo da je A puna matrica, s reda veličine n elemenata različitih od nule u svakom retku. Za cijeli vektor $b_j^{(m)}$ trebamo reda veličine $O(n_j \cdot (n - n_j))$ operacija, što odgovara množenju matrice tipa $n_j \times (n - n_j)$ i vektora duljine n , jer preskačemo dijagonalni blok u sumi. Drugim riječima, računanje svake komponente vektora $b_j^{(m)}$ zahtijeva $O(n - n_j)$ aritmetičkih operacija.

Efikasna realizacija operacije $A_{jj}^{-1} b_j^{(m)}$ ovisi ne samo o strukturi matrice A_{jj} i njezinog inverza, već i o broju potrebnih iteracija. Ako je A_{jj} puna matrica razumno malog reda, onda se operacija $A_{jj}^{-1} b_j^{(m)}$ svodi na rješavanje linearnog sustava s matricom A_{jj} . Direktno rješavanje tog sustava, na primjer, Gausovim eliminacijama, zahtijeva $O(n_j^3)$ operacija u svakoj iteraciji, što je skupo.

Ako ima dovoljno memorije, više se isplati unaprijed, prije iteracija, izračunati i zapamtiti LR faktorizacije svih matrica A_{jj} . Za svaku pojedinu matricu, to opet treba $O(n_j^3)$ operacija, ali samo jednom, a ne u svakoj iteraciji. Ukupni broj operacija u toj prvoj fazi je reda veličine

$$c \cdot \sum_{j=1}^N n_j^3,$$

gdje je $c = 2/3$ za standardnu LR faktorizaciju. U idealnom slučaju, kad je $N = \sqrt{n}$ i svi blokovi imaju istu dimenziju $n_j = \sqrt{n}$, dobivamo da je broj operacija u prvoj fazi

$$\frac{2}{3} \cdot \sum_{j=1}^{\sqrt{n}} (\sqrt{n})^3 = \frac{2}{3} \sqrt{n} \cdot n^{3/2} = \frac{2}{3} n^2,$$

što je **brže** od jedne iteracije komponentne iterativne metode za pune matrice.

Nakon prve faze, za rješavanje sustava s matricom A_{jj} u svakoj iteraciji trebamo samo $O(n_j^2)$ operacija — za supstitucije unaprijed i unatrag. Za računanje cijele nove blok komponente $x_j^{(m+1)}$ trebamo ukupno reda veličine

$$n_j(n - n_j) + n_j^2 = n_j \cdot n$$

operacija, ili reda veličine n operacija po svakom elementu, s tim da dulje traje računanje vektora desne strane $b_j^{(m)}$, nego rješavanje linearnog sustava. Kad pozabramo po svim blokovima, vidimo da jedna blok iteracija ima **podjednak** broj operacija $O(n^2)$ kao i komponentna iteracija. Cijeli ovaj postupak se još dodatno isplati ako su A_{jj} šuplje matrice.

Druga alternativa je eksplicitno računanje i pamćenje inverza A_{jj}^{-1} . U tom slučaju, operacija $A_{jj}^{-1}b_j^{(m)}$ se svodi na množenje matrice i vektora u svakoj iteraciji. Ako je A_{jj}^{-1} puna matrica, trajanje je, također, $O(n_j^2)$ operacija u svakoj iteraciji.

U općem slučaju, preciznija analiza pokazuje da je bolja prva alternativa. Stvarna ušteda je u prvoj fazi, jer ne treba riješiti n_j linearnih sustava s raznim desnim stranama (jediničnim vektorima) za nalaženje inverza. Broj operacija u svakoj iteraciji je podjednak za obje alternative. Naravno, ako je A_{jj}^{-1} šuplja matrica ili se jednostavno računa, onda je bolja druga alternativa.

Ako je A šuplja matrica s konstantnim brojem elemenata različitih od nule u svakom retku, onda računanje svake komponente vektora $b_j^{(m)}$ zahtijeva samo konstantan broj operacija. No, tad su i svi dijagonalni blokovi A_{jj} šuplje matrice s najviše konstantnim brojem elemenata različitih od nule u svakom retku. Ostatak zaključka bitno ovisi o strukturi i svojstvima matrica A_{jj} , jer pivotiranje u Gaussovima eliminacijama može uništiti strukturu matrice, tako da opet trebamo $O(n_j^3)$ operacija za LR faktorizaciju.

Srećom, u većini praktičnih problema unaprijed znamo (iz prirode problema) da pivotiranje u Gaussovima eliminacijama, odnosno, LR faktorizaciji, **nije** potrebno, i da matrice A_{jj} imaju specijalnu šuplju strukturu, koja se čuva u procesu eliminacije, tj. u LR faktorizaciji. Direktno rješavanje linearnog sustava s takvom matricom treba linearan broj operacija u redu matrice, tj. $O(n_j)$ operacija, neovisno o tome radimo li prvo LR faktorizaciju ili ne. Dakle, trebamo konstantan broj operacija po svakoj komponenti, odnosno, za svaku novu iteraciju $x^{(m+1)}$ trebamo reda veličine $O(n)$ operacija. “Skriveni” faktor uz n može biti nešto veći nego kod

komponentnih metoda, a ovisi o strukturi matrice A_{jj} i algoritmu za rješavanje pripadnog sustava. Posebno, ako su A_{jj} još i vrpčaste matrice za koje pivotiranje nije potrebno, onda je i “skriveni” faktor podjednak.

Već smo rekli da kod standardne diskretizacije s 5 točaka za Poissonovu jednadžbu na kvadratu, matrica A ima najviše 5 elemenata različitih od nule u svakom retku. Kod prirodne numeracije čvorova dobivamo idealnu blok strukturu matrice A — imamo $N = \sqrt{n}$ blokova jednakih veličina, reda N . Dodatno, svi dijagonalni blokovi D_j su **tridijagonalne** pozitivno definitne matrice, tako da Gaussove eliminacije ne trebaju pivotiranje. Direktan algoritam za rješavanje linearnog sustava s matricom D_j treba samo $O(N)$ operacija. Osim toga, svi dijagonalni blokovi su **iste** matrice $D_j = S_N$, tako da možemo unaprijed zapamtiti LR faktorizaciju matrice S_N , iako to ne donosi bitne uštede, jer je matrica tridijagonalna.

Na kraju, od onih najviše 5 elemenata različitih od nule u svakom retku, većina ih je u dijagonalnim blokovima (po dva ili tri). U izvandijagonalnim blokovima imamo po jedan ili najviše dva elementa različita od nule, tako da se računanje komponenti vektora $b_j^{(m)}$ svodi na jedno ili dva oduzimanja. Broj operacija u blok iterativnim metodama je isti kao kod komponentnih, a pokazali smo da blok metode zahtijevaju **manje** iteracija za istu točnost.