Znanstveno računanje 1

2. dio vježbi

Iterativne metode za linearne sustave

Nela Bosner

Iterativne metode za linearne sustave

- Sustavi linearnih jednadžbi pojavljuju se kao posljedica rješavanja mnogih problema u fizici, kemiji, biologiji, strojarstvu, građevini ...
- **Problem:** Za regularnu matricu $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ i vektor $b \in \mathbb{R}^n$ naći $x \in \mathbb{R}^n$ takav da je
$$Ax = b.$$
- **Rješenje:** $x = A^{-1}b$
- Metoda Gaussovih eliminacija često nije pogodna za matrice velikih dimenzija i strukturirane matrice.
- U tim slučajevima se koriste iterativne metode, koje najčešće daju aproksimativna rješenja.
- Željena točnost aproksimativnog rješenja postiže se zadavanjem odgovarajućeg kriterija zaustavljanja.

Algoritam (Iterativna metoda)

x_0 zadan;
$k = 0$;
***while** (!kriterij_zaustavljanja){*
    $k++$;
    $x_k = f(x_{k-1})$;
}
$x \approx x_k$;

Važno je da:

- za svaki k formula $f(x_{k-1})$ za računanje x_k je jednostavna
- x_k teži prema $x = A^{-1}b$ i za neki k (obično $k \ll n$) je x_k prihvatljiva aproksimacija za x
- konvergencija x_k prema x je što brža

Matrične norme

- Kod nekih iterativnih metoda za rješavanje sustava linearnih jednadžbi računanje kriterija zaustavljanja zahtijeva računanje matrične norme.
- S druge strane, matrične norme koriste se za mjerenja greški budući da se kod numeričkog rješavanja one uvijek pojavljuju zbog korištenja aritmetike konačne preciznosti.

Definicija

Preslikavanje $\nu : \mathbb{C}^{m\times n} \longrightarrow \mathbb{R}$ *je* ***matrična norma*** *na* $\mathbb{C}^{m\times n}$ *ako zadovoljava sljedeće uvjete:*

1. $\nu(A) \geq 0$, *za svako* $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$
2. $\nu(A) = 0$ *ako i samo ako je* $A = 0$
3. $\nu(\alpha A) = |\alpha|\nu(A)$, *za* $\alpha \in \mathbb{C}$, $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$
4. $\nu(A + B) \leq \nu(A) + \nu(B)$, *za sve* $A, B \in \mathbb{C}^{m\times n}$

Nazivi uvjeta:

1.–2. $\rightarrow$ *pozitivna definitnost,*

3. $\rightarrow$ *homogenost,*

4. $\rightarrow$ *nejednakost trokuta.*

Definicija

Neka su μ, ν i ρ matrične norme na $\mathbb{C}^{m\times n}$, $\mathbb{C}^{n\times k}$ i $\mathbb{C}^{m\times k}$ redom. One su konzistentne ako je

$$\rho(AB) \leq \mu(A)\nu(B),$$

za svaki izbor $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ i $B \in \mathbb{C}^{n\times k}$.
Specijalno, matrična norma ν na $\mathbb{C}^{n\times n}$ je konzistentna ako je

$$\nu(AB) \leq \nu(A)\nu(B),$$

za sve $A, B \in \mathbb{C}^{n\times n}$.

Napomena

- *Gornja definicija obuhvaća i konzistentnost matrične i vektorske norme, jer prirodno identificiramo* $\mathbb{C}^{n\times 1}$ *i* $\mathbb{C}^n$.
- *Ako je* ν *konzistentna matrična norma na* $\mathbb{C}^{n\times n}$ *i* A_1, $A_2, \ldots, A_m \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *proizvoljne matrice, indukcijom se odmah vidi da je*

$$\nu(A_1 A_2 \cdots A_m) \leq \nu(A_1)\nu(A_2)\cdots\nu(A_m).$$

Specijalno, za svako $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *i* $m \in \mathbb{N}$ *je*

$$\nu(A^m) \leq \nu(A)^m.$$

- Standardna Euklidska vektorska norma ima jedno povoljno svojstvo, a to je:

$$\|Ux\|_2 = \|x\|_2, \quad x \in \mathbb{C}^n,\ U \in \mathbb{C}^{n\times n}\ U^*U = UU^* = I,$$

- Budući da je U unitarna matrica ovo svojstvo zove se **unitarna invarijantnost** vektorske norme, pri čemu djelovanje matrice U čuva udaljenosti.
- Takvo svojstvo može se definirati i za matrične norme.

Definicija

Norma ν na $\mathbb{C}^{m\times n}$ je unitarno invarijantna ako je:

$$\nu(U^*AV) = \nu(A),$$

za sve unitarne matrice $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$, $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ i sve $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$.

Teorem

Ako je ν konzistentna matrična norma na $\mathbb{C}^{n\times n}$, onda postoji vektorska norma $\|\ \|$ na $\mathbb{C}^n$ koja je konzistentna sa ν.

Dokaz.

Za $a \in \mathbb{C}^n$, $a \neq 0$ definirajmo

$$\|x\| = \nu(xa^T), \qquad \text{za } \forall x \in \mathbb{C}^n.$$

- Lako se pokaže da je to norma.
- Vrijedi

$$\|Ax\| \leq \nu(A)\|x\|, \quad \text{za } \forall x \in \mathbb{C}^n.$$

$\square$

Definicija

Neka je $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, tada je sa

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

definiran spektralni radijus matrice A.

Teorem

Neka je ν konzistentna matrična norma na $\mathbb{C}^{n\times n}$. Tada za svaku matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ vrijedi

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

Teorem

Za svaku matricu $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ i za svaki $\varepsilon > 0$ postoji konzistentna matrična norma $\nu_{A,\varepsilon}$ na $\mathbb{C}^{n\times n}$ takva da je

$$\nu_{A,\varepsilon}(A) \leq \rho(A) + \varepsilon.$$

Teorem

Neka je $\|\ \|$ proizvoljna norma na $\mathbb{C}^n$. Preslikavanje $\nu : \mathbb{C}^{n\times n} \longrightarrow \mathbb{R}$, definirano sa

$$\nu(A) = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|},$$

za $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, je konzistentna matrična norma na $\mathbb{C}^{n\times n}$, konzistentna je sa $\|\ \|$, i zove se ***operatorska norma na $\mathbb{C}^{n\times n}$, inducirana vektorskom normom $\|\ \|$.***

Napomena

Nužan uvijet da bi ν bila operatorska norma je

$$\nu(I) = \max_{\|x\|=1} \|Ix\| = \max_{\|x\|=1} \|x\| = 1,$$

pri čemu je I identiteta.

Primjeri matričnih normi

Neka je $A = [a_{ij}] \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Sljedeća preslikavanja definiraju konzistentne matrične norme na $\mathbb{C}^{n \times n}$.

Primjer

$\| \ \|_F : \mathbb{C}^{n \times n} \longrightarrow \mathbb{R}$,

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|^2} = \sqrt{tr(A^* A)},$$

zove se ***Frobeniusova*** *ili* ***Euklidska norma***. *(Na $\mathbb{C}^{n \times 1} \cong \mathbb{C}^n$ je $\| \ \|_F = \| \ \|_2$.)*

Primjer (nastavak)

- *Frobeniusova norma nije operatorska norma za $n > 1$ jer je*

$$\|I\|_F = \sqrt{n}.$$

- *Frobeniusova matrična norma $\| \ \|_F$ i euklidska vektorska norma $\| \ \|_2$ su konzistentne jer je za $x \in \mathbb{C}^n$*

$$\|Ax\|_F \leq \|A\|_F \|x\|_F = \|A\|_F \|x\|_2.$$

- *Frobeniusova norma $\| \ \|_F$ je unitarno invarijantna.*

Primjer

$\| \; \|_2 : \mathbb{C}^{n\times n} \longrightarrow \mathbb{R}$,

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

zove se **spektralna norma**.

- *Spektralna matrična norma* $\| \; \|_2$ *je operatorska norma na* $\mathbb{C}^{n\times n}$ *inducirana vektorskom normom* $\| \; \|_2$

$$\|A\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2$$

- *Maksimum se postiže u vektoru* $y^{(2)}$ *za kojeg vrijedi*

$$A^*Ay^{(2)} = \lambda_{max}(A^*A)y^{(2)}, \quad \|y^{(2)}\|_2 = 1,$$

Primjer (nastavak)

tj. $y^{(2)}$ je jednak jediničnom svojstvenom vektoru matrice A^*A koji odgovara najvećoj svojstvenoj vrijednosti $\lambda_{max}(A^*A)$, i tada je

$$\|Ay^{(2)}\|_2 = \|A\|_2.$$

- *Vrijedi konzistentnost s vektorskom normom, za $x \in \mathbb{C}^n$*

$$\|Ax\|_2 \leq \|A\|_2 \|x\|_2$$

- *Spektralna norma $\| \ \|_2$ je unitarno invarijantna.*

Primjer

$\| \ \|_1 : \mathbb{C}^{n\times n} \longrightarrow \mathbb{R}$,

$$\|A\|_1 = \max_{j=1,\ldots,n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}|.$$

- *Matrična norma $\| \ \|_1$ je operatorska norma na $\mathbb{C}^{n\times n}$ inducirana vektorskom normom $\| \ \|_1$*

$$\|A\|_1 = \max_{\|x\|_1=1} \|Ax\|_1$$

- *Maksimum se postiže u vektoru*

$$y^{(1)} = e_{j_0} = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}^T, \\ \qquad\qquad\quad j_0 \end{array}$$

Primjer (nastavak)

pri čemu je $j_0 \in \{1, \ldots, n\}$ takav da je

$$\sum_{i=1}^{n} |a_{ij_0}| = \max_{j=1,\ldots,n} \sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| = \|A\|_1,$$

i tada je

$$\|Ay^{(1)}\|_1 = \|A\|_1.$$

- *Vrijedi konzistentnost s vektorskom normom, za $x \in \mathbb{C}^n$*

$$\|Ax\|_1 \leq \|A\|_1 \|x\|_1$$

Primjer

$\| \ \|_\infty : \mathbb{C}^{n\times n} \longrightarrow \mathbb{R}$,

$$\|A\|_\infty = \max_{i=1,\dots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|.$$

- *Matrična norma $\| \ \|_\infty$ je operatorska norma na $\mathbb{C}^{n\times n}$ inducirana vektorskom normom $\| \ \|_\infty$*

$$\|A\|_\infty = \max_{\|x\|_\infty = 1} \|Ax\|_\infty$$

- *Maksimum se postiže u vektoru*

$$y^{(\infty)}(j) = \left\{ \begin{array}{ll} \frac{a_{i_0 j}}{|a_{i_0 j}|}, & a_{i_0 j} \neq 0 \\ 1, & a_{i_0 j} = 0 \end{array} \right\}, j = 1, \dots, n,$$

Primjer (nastavak)

pri čemu je $i_0 \in \{1, \ldots, n\}$ *takav da je*

$$\sum_{j=1}^{n} |a_{i_0 j}| = \max_{i=1,\ldots,n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| = \|A\|_\infty,$$

i tada je

$$\|Ay^{(\infty)}\|_\infty = \|A\|_\infty.$$

- *Vrijedi konzistentnost s vektorskom normom, za* $x \in \mathbb{C}^n$

$$\|Ax\|_\infty \leq \|A\|_\infty \|x\|_\infty$$

Sve prikazane norme mogu se definirati i na $\mathbb{C}^{m \times n}$.

Obzirom da je $\mathbb{C}^{m\times n} \cong \mathbb{C}^{mn}$ a na $\mathbb{C}^{mn}$ sve su vektorske norme ekvivalentne, to vrijedi i za matrične norme.

Napomena

Neka su $\| \ \|_p$ i $\| \ \|_q$ matrične norme na $\mathbb{C}^{m\times n}$, tada je za svaku matricu $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$

$$\|A\|_p \leq \alpha_{pq}\|A\|_q,$$

pri čemu se jednakost dostiže, a konstante α_{pq} tabelirane su u sljedećoj tablici.

$\| \ \|_p$ \ $\| \ \|_q$	$\| \ \|_1$	$\| \ \|_2$	$\| \ \|_\infty$	$\| \ \|_F$
$\| \ \|_1$	1	$\sqrt{m}$	m	$\sqrt{m}$
$\| \ \|_2$	$\sqrt{n}$	1	$\sqrt{m}$	1
$\| \ \|_\infty$	n	$\sqrt{n}$	1	$\sqrt{n}$
$\| \ \|_F$	$\sqrt{n}$	$\sqrt{rang(A)}$	$\sqrt{m}$	1

Standardne iteracije

- Iterativnu metodu pokušavamo naći u obliku

$$x_{k+1} = Tx_k + c, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, \quad x_0 \text{ zadan},$$

gdje je $T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ **matrica iteracije** i $c \in \mathbb{R}^n$.

- Jedan način odabira iterativne matrice T je taj da matricu sustava A rastavimo na

$$A = M - N, \qquad M \text{ regularna.}$$

- Tada se polazni linearni sustav transformira u

$$x = M^{-1}Nx + M^{-1}b, \quad \text{tj.} \quad x = Tx + c$$

gdje je

$$T = M^{-1}N, \qquad c = M^{-1}b$$

- Rješenje sustava je onda fiksna točka iteracija

$$x_{k+1} = M^{-1}Nx_k + M^{-1}b, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots$$

Konvergencija standardnih iteracija

Teorem

Neka je $b \in \mathbb{R}^n$ *i* $A = M - N \in \mathbb{R}^{n \times n}$ *regularna matrica. Ako je*

- *M regularna matrica,*

tada niz iteracija $\{x_k, k \geq 0\}$ *definiran sa*

$$x_{k+1} = M^{-1}Nx_k + M^{-1}b, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

konvergira prema $x = A^{-1}b$ *za proizvoljnu početnu iteraciju* x_0, ***ako i samo ako***

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

Tvrdnja teorema vrijedi i ***ako*** *je* $\|M^{-1}N\| < 1$ *za bilo koju konzistentnu matričnu normu* $\| \ \|$.

Teorem

- *Neka vrijede pretpostavke o normi za $T = M^{-1}N$ kao u prethodnom teoremu ($\|T\| < 1$).*
- *Pretpostavimo da tražimo aproksimaciju rješenja takvu da vrijedi*
$$\|x_k - x\| < \varepsilon,$$
gdje je $\|\cdot\|$ neka od normi $\|\cdot\|_1$, $\|\cdot\|_2$ ili $\|\cdot\|_\infty$.

Za kriterij zaustavljanja je dovoljno tražiti da je

$$\frac{\|T\|^k}{1 - \|T\|}\|x_1 - x_0\| < \varepsilon,$$

odnosno

$$k > \frac{\ln\left(\frac{\varepsilon(1-\|T\|)}{\|x_1-x_0\|}\right)}{\ln(\|T\|)}.$$

Jacobijeva metoda

Matricu $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ rastavimo kao

$$A = L + D + R,$$

tako da su

$$\begin{aligned} L &= \text{donji trokut od } A \\ D &= \text{dijagonala od } A \\ R &= \text{gornji trokut od } A \end{aligned}$$

uz pretpostavku da A nema nula na dijagonali.

- Kod Jacobijeve metode je

$$M_J = D, \qquad N_J = -(L + R),$$

- ona je iterativna metoda oblika

$$x_{k+1} = T_J x_k + c_J, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

- za koju je

$$T_J = -D^{-1}(L + R), \qquad c_J = D^{-1}b.$$

Pogledamo li po komponentama računanje aproksimacije u $(k+1)$-oj iteraciji dobivamo

$$
\begin{aligned}
x_{k+1}(i) &= \sum_{j=1}^{n} T_J(i,j) \cdot x_k(j) + c_J(i) \\
&= -\sum_{j=1}^{i-1} \frac{A(i,j)}{A(i,i)} \cdot x_k(j) - \sum_{j=i+1}^{n} \frac{A(i,j)}{A(i,i)} \cdot x_k(j) + \frac{b(i)}{A(i,i)} \\
&= \frac{1}{A(i,i)} \left[b(i) - \sum_{j=1}^{i-1} A(i,j) \cdot x_k(j) - \sum_{j=i+1}^{n} A(i,j) \cdot x_k(j) \right]
\end{aligned}
$$

Algoritam (Jacobijeva metoda)

```
x0 zadan;
k = 0;
while (!kriterij_zaustavljanja){
    k++;
    for (i = 0; i < n; i++){
        x1[i] = b[i];
        for (j = 0; j < i; j++)
            x1[i] = x1[i] - A[i][j] * x0[j];
        for (j = i + 1; j < n; j++)
            x1[i] = x1[i] - A[i][j] * x0[j];
        x1[i] = x1[i]/A[i][i];
    }
    x0 = x1;
}
x ≈ x0;
```

Konvergencija Jacobijeve metode

Teorem

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

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

tada Jacobijeva metoda konvergira za svaku početnu iteraciju.

Gauss–Seidelova metoda

Matricu $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ rastavimo isto kao kod Jacobijeve metode

$$A = L + D + R.$$

- Kod Gauss–Seidelova metode je

$$M_{GS} = D + L, \qquad N_{GS} = -R,$$

- ona je iterativna metoda oblika

$$x_{k+1} = T_{GS}x_k + c_{GS}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

- za koju je

$$T_{GS} = -(D + L)^{-1}R, \qquad c_{GS} = (D + L)^{-1}b.$$

Najprije iteraciju napišemo u obliku

$$(D+L)x_{k+1} = -Rx_k + b.$$

Sada pogledamo komponente prethodnog računanja aproksimacije u $(k+1)$-oj iteraciji, i dobivamo

$$\sum_{j=1}^{i} A(i,j)\cdot x_{k+1}(j) = -\sum_{j=i+1}^{n} A(i,j)\cdot x_k(j) + b(i)$$

$$A(i,i)x_{k+1}(i) = -\sum_{j=1}^{i-1} A(i,j)x_{k+1}(j) - \sum_{j=i+1}^{n} A(i,j)x_k(j) + b(i)$$

Ako pretpostavimo da su u prethodnim koracima izračunate komponente $j=1,\ldots,i-1$ od x_{k+1}, tada

$$x_{k+1}(i) = \frac{1}{A(i,i)}\left[b(i) - \sum_{j=1}^{i-1} A(i,j)\cdot x_{k+1}(j) - \sum_{j=i+1}^{n} A(i,j)\cdot x_k(j)\right]$$

Algoritam (Gauss–Seidelova metoda)

$x0$ *zadan;*
$k = 0;$
while $(!kriterij\_zaustavljanja)\{$
  $k++;$
  for $(i = 0; i < n; i++)\{$
    $x0[i] = b[i];$
    for $(j = 0; j < i; j++)$
      $x0[i] = x0[i] - A[i][j] * x0[j];$
    for $(j = i + 1; j < n; j++)$
      $x0[i] = x0[i] - A[i][j] * x0[j];$
    $x0[i] = x0[i]]/A[i][i];$
  $\}$
$\}$
$x \approx x0;$

Konvergencija Gauss–Seidelova metode

Teorem

Ako je matrica sustava $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična pozitivno definitna matrica, tada Gauss–Seidelova metoda konvergira za svaku početnu iteraciju.

SOR metoda

- U iteracije se uvodi **parametar relaksacije** ω koji nastoji smanjiti spektralni radijus matrice iteracije i ubrzati konvergenciju.
- To se radi pomoću sljedećeg rastava:

$$A = \frac{1}{\omega} D + L + \frac{\omega - 1}{\omega} D + R.$$

- Kod SOR metode je

$$M_{SOR,\omega} = \frac{1}{\omega} D + L, \qquad N_{SOR,\omega} = \frac{1-\omega}{\omega} D - R,$$

- ona je iterativna metoda oblika

$$x_{k+1} = T_{SOR} x_k + c_{SOR}, \quad k = 0, 1, 2, \ldots$$

- za koju je

$$T_{SOR,\omega} = (D+\omega L)^{-1}[(1-\omega)D - \omega R], \qquad c_{SOR,\omega} = \omega(D+\omega L)^{-1} b.$$

- Za $\omega = 1$ SOR se svodi na Gauss–Seidelovu metodu.

Na isti način kao i kod Gauss–Seidelove metode izvodimo računanje aproksimacije u $(k+1)$-oj iteraciji po komponentama, čime dobivamo

$$x_{k+1}(i) = (1-\omega)x_k(i) + \frac{\omega}{A(i,i)}\left[b(i) - \sum_{j=1}^{i-1} A(i,j)\cdot x_{k+1}(j) - \sum_{j=i+1}^{n} A(i,j)\cdot x_k(j)\right]$$

Algoritam (SOR metoda)

```
x0, omega    zadani;
k = 0;
while (!kriterij_zaustavljanja){
    k++;
    for (i = 0; i < n; i++){
        x0[i] = (1 - omega) * x0[i];
        pom = b[i];
        for (j = 0; j < i; j++)
            pom = pom - A[i][j] * x0[j];
        for (j = i + 1; j < n; j++)
            pom = pom - A[i][j] * x0[j];
        x0[i] = x0[i] + pom * omega/A[i][i];
    }
}
x ≈ x0;
```

Konvergencija SOR metode

Teorem

Ako je matrica sustava $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ simetrična pozitivno definitna matrica, tada SOR metoda konvergira za $\omega \in \langle 0, 2\rangle$ i za svaku početnu iteraciju.

Teorem

SOR metoda ne konvergira za $\omega < 0$ i $\omega \geq 2$.

Primjer

Rješavamo sustav $Ax = b$, pri čemu su

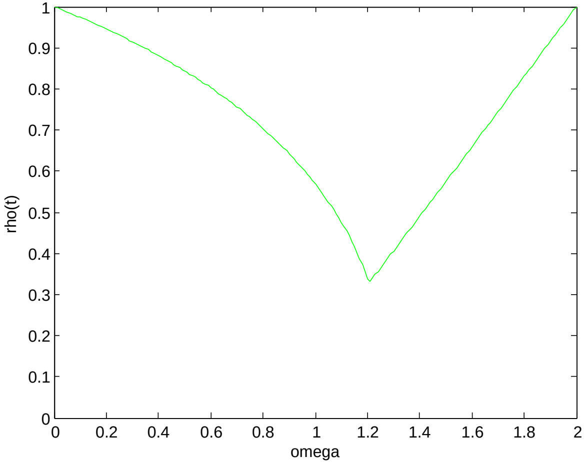
$$A = \begin{bmatrix} 16 & -4 & 8 & 12 \\ -4 & 4 & -7 & 3 \\ 8 & -7 & 78 & 32 \\ 12 & 3 & 32 & 113 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 32 \\ -4 \\ 111 \\ 160 \end{bmatrix},$$

pomoću SOR metode. Egzaktno rješenje ovog sustava je $x = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}^T$.

- *U ovom slučaju uzet ćemo normu reziduala kao kriterij zaustavljanja: iteracije se zaustavljaju kada je*

$$\|b - Ax_k\|_2 < 10^{-5}.$$

- *Provjerit ćemo brzinu konvergencije za Gauss–Seidelovu metodu, i za SOR sa optimalnim* ω.



Slika: Spektralni radijus SOR matrice iteracije za matricu A.

Primjer (nastavak)

- *Gauss–Seidelova metoda je dala aproksimaciju rješenja zadane točnosti nakon 25 iteracija:*

$$x_{25} = \begin{bmatrix} 1.000000772995056 \\ 1.000001609599571 \\ 1.000000194934762 \\ 0.999999819976533 \end{bmatrix}.$$

- *Iz prethodnog grafa vidimo da je optimalni* $\omega \approx 1.2$ *za SOR metodu. U tom slučaju SOR daje aproksimaciju rješenja zadane točnosti nakon 15 iteracija:*

$$x_{15} = \begin{bmatrix} 1.000000072364893 \\ 1.000000690648456 \\ 1.000000090546232 \\ 0.999999975329080 \end{bmatrix}.$$

Zadaci

Zadatak

Napišite program koji učitava:

- *matricu A*
- *vektor b*
- *početnu iteraciju x_0*
- *parametar relaksacije ω*
- *točnost aproksimacije ε*

Program treba izračunati aproksimaciju rješenja sustava $Ax = b$ pomoću SOR metode, zadane točnosti. Najprije se treba provijeriti da li SOR uopće konvergira,

- *i to tako da se provjeri da li je $\|T_{SOR,\omega}\|_\mu < 1$ za jednu od normi $\mu = 1, \infty, F$.*

Zadatak (nastavak)

- *Ako je prethodni uvjet zadovoljen, program treba izračunati broj iteracija potrebnih za dostizanje zadane točnosti, prema Teoremu sa str. 24,*
- *i onda izvršiti toliki broj iteracija SOR metode.*

Na kraju treba ispisati

- *aproksimaciju rješenja*
- *broj iteracija potrebnih za dostizanje zadane točnosti.*

Zadatak (nastavak)

Za realizaciju programa napišite sljedeće potprograme:

- `sor_norma()` — *vraća (1, ∞, ili F) normu matrice iteracija za SOR metodu. Koristite CLAPACK potprograme:*
  - `dlacpy_()` — *kopira cijelu matricu ili njene dijelove (gornji ili donji trokut)*
  - `dtrsm_()` — *(BLAS) računa produkt inverza trokutaste matrice s nekom drugom matricom*
  - `dlange_()` — *računa normu matrice*
- `sor_konvergencija()` — *vraća 1 ako metoda konvergira ($\|T_{SOR}\| < 1$), ili 0 inače*
- `sor_rjesavac()` — *najprije nakon prve iteracije SOR-a računa kriterij zaustavljanja, a onda računa aproksimaciju rješenja sustava*

Zadatak (nastavak)

Uputa: *Za računanje matrice iteracija uzmite:*

- $M = D + \omega L$
- $N = (1 - \omega)D - \omega R$

Kod obje matrice ne radi se o pravom zbrajanju matrica, jer u svakom elementu matrice M (ili N) najviše jedna od matrica D i L (ili D i R) ima netrivijalan element.

- *Matricu M kreirajte kopiranjem donjeg trokuta od A (pogledajte ulazne parametre od `dlacpy_()`) i množenjem ispoddijagonalnih elemenata sa ω.*
- *Matricu N kreirajte kopiranjem gornjeg trokuta od A, i množenjem iznaddijagonalnih elemenata sa $-\omega$, a dijagonalnih sa $(1 - \omega)$.*
- *Matricu iteracije računajte kao $M^{-1}N$ pomoću `dtrsm_()`.*

Zadatak (nastavak)

Vaš program testirajte na sustavu $Ax = b$, gdje je

$$A = \begin{bmatrix} 101 & -4 & 8 & 12 \\ -4 & 20 & -7 & 3 \\ 8 & -7 & 78 & 32 \\ 12 & 3 & 32 & 113 \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 117 \\ 12 \\ 111 \\ 160 \end{bmatrix},$$

a za optimalni ω uzmite 1.05.

Zadatak

Napišite drugu verziju program za računanje aproksimacije rješenja sustava $Ax = b$ pomoću SOR metode koja

- *dinamički provjerava kriterij zaustavljanja u svakoj iteraciji, i ako je zadovoljen završava sa metodom,*
- *i testira ju na 100×100 Stieltjesovoj matrici koja je spremljena u datoteci* `stieltjes_matr.txt` *na*

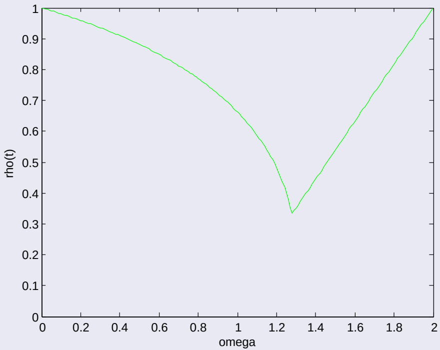
  http://www.math.hr/~nela/zr1.html

Matricu učitajte u svoj program na sljedeći način:

```
FILE *f;
double *a;
int i, n=100;
a=malloc(n*n*sizeof(double));
f=fopen("stieltjes_matr.txt","r");
for (i=0;i<n*n;i++){
    fscanf(f,"%lf",a+i);
}
fclose(f);
```

Zadatak (nastavak)

Vektor b generirajte tako da egzaktno rješenje bude $\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}^T$ *pomoću potprograma* `dlaset_()` *i* `dgemv_()`. *Kriterij zaustavljanja neka je* $\|b - Ax_k\|_2 / \|b\|_2 \leq \varepsilon$.



Slika: Spektralni radijus SOR matrice iteracije za Stieltjesovu matricu.

Zadatak (nastavak)

Uputa: *Za računanje kriterija zaustavljanja koristite sljedeće:*

- *Alocirajte polje r duljine n i u njega iskopirajte vektor b pomoću BLAS potprograma* `dcopy_()`,
- *pomoću BLAS potprograma* `dgemv_()` *izračunajte rezidual* $b - Ax_k$ *od jednom,*
- *pomoću BLAS funkcije* `dnrm2_()` *izračunajte normu reziduala i normu vektora b (nju treba samo jednom).*

Iteracije iz Krylovljevih potprostora

Rezultat iz linearne algebre: svaka matrica poništava svoj karakteristični i minimalni polinom.

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

gdje je

$$A \in \mathbb{R}^{n\times n}, \quad \kappa_A(\lambda) = \det(A - \lambda I) = \sum_{i=0}^{n} a_i \lambda^i.$$

- Kada je matrica regularna $\Rightarrow a_0 \neq 0$,
$$A^{-1} = -\frac{1}{a_0}(a_1 I + \cdots + a_{n-1} A^{n-2} + a_n A^{n-1}).$$
- Rješenje sustava $Ax = b$ možemo zapisati kao $x = A^{-1}b$,
$$x = -\frac{a_1}{a_0} b - \cdots - \frac{a_{n-1}}{a_0} A^{n-2} b - \frac{a_n}{a_0} A^{n-1} b,$$

- odnosno

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

- Prostor $\mathcal{K}_n(A, b)$ zovemo *Krylovljevim prostorom* matrice A i inicijalnog vektora b.
- Ideja za iterativne metode rješavanja sustava linearnih jednadžbi: iteracije su aproksimacije rješenja iz Krylovljevih potprostora.

Metoda konjugiranih gradijenata

- To je iterativna metode iz Krylovljevih potprostora, za rješavanje sustava $Ax = b$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $b, x \in \mathbb{R}^n$, pri čemu je matrica sustava A *simetrična pozitivno definitna*:
  - $A^T = A$
  - $y^T Ay > 0$ za svaki $y \in \mathbb{R}^n$, $y \neq 0$
- Sa $\langle x, y\rangle_A = y^T Ax$ dobro je definirani skalarni produkt (provjerite aksiome).
- Sa $\|x\|_A = \sqrt{\langle x, x\rangle_A} = \sqrt{x^T Ax}$ definirana je *A-norma*.
- Za primjenu metode ne trebamo pristupati pojedinim elementima matrice.
- Dovoljno je znati djelovanje matrice na vektor $A \cdot y$ — često se zadaje kao funkcija od y.

Algoritam (Metoda konjugiranih gradijenata (CG))

x_0 *zadan;*
$d_0 = r_0 = b - Ax_0;$
$k = 0;$
while (!*kriterij_zaustavljanja*){

$$\alpha_k = \frac{r_k^T r_k}{d_k^T A d_k};$$
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k;$$
$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k;$$
$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T r_{k+1}}{r_k^T r_k};$$
$$d_{k+1} = r_{k+1} + \beta_{k+1} d_k;$$
$$k = k + 1;$$

}

Konvergencija metode konjugiranih gradijenata

Teorem

- *Greška e_k dobivena u k-tom koraku metode konjugiranih gradijenata ima najmanju A-normu na prostoru*

$$e_0 + span\{Ae_0, A^2e_0, \ldots, A^ke_0\}.$$

- *U svakom koraku CG algoritma, duljina vektora greške $e_k = x - x_k$ se reducira, pri čemu je $A^{-1}b = x = x_m$, za neki $m \leq n$.*

Teorem

- *Greška e_k dobivena u k-tom koraku metode konjugiranih gradijenata zadovoljava*

$$\|e_k\|_A \leq \min_{p_k\in\mathbb{P}_k, p_k(0)=1} \max_{i=1,\ldots,n} |p_k(\lambda_i)| \|e_0\|_A,$$

  pri čemu su $\lambda_1, \ldots, \lambda_n$ svojstvene vrijednosti od A.

- *Primijenjiva ocjena je dana sa*

$$\|e_k\|_A \leq 2\left(\frac{\sqrt{\kappa_2(A)}-1}{\sqrt{\kappa_2(A)}+1}\right)^k \|e_0\|_A.$$

  pri čemu je $\kappa(A)_2 = \|A\|_2 \cdot \|A^{-1}\|_2 = \lambda_{max}/\lambda_{min}$ broj uvjetovanosti matrice A.

Zadaci

Zadatak

Napišite potprogram `cg()` *koji implementira metodu konjugiranih gradijenata. Ulazni parametri neka su*

- *dimenzija problema n*
- *matrica A i vektor b*
- *početna iteracija x_0*
- *tolerancija tol*

Kriterij zaustavljanja je $\|r_k\|_2/\|b\|_2 \leq tol$, gdje je $r_k = b - Ax_k$.

Zadatak

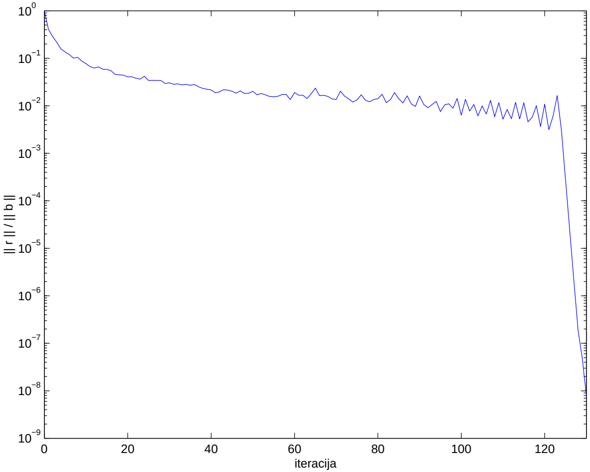
Matrica sustava u ovom zadatku je simetrična pozitivno definitna 100×100 *matrica, sa svojstvenim vrijednostima* $\lambda(A) \in \{1, 4, 9, \ldots, 10000\}$*, a dobivena je kao produkt* $A = Q \Lambda Q^T$*, pri čemu je* Λ *dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti, a Q slučajna ortogonalna matrica. Za generiranje matrice Q koristite sljedeće CLAPACK potprograme:*

- `dlarnv_()` *za generiranje matrice slučajnih brojeva*
- `dgeqrf_()` *za računanje QR faktorizacije (Q ortogonalna, R gornjetrokutasta)*
- `dormqr_()` *za množenje matrice sa matricom Q*

Uvjetovanost ovako definirane matrice jednaka je $\kappa(A) = 10^4$.

Zadatak (nastavak)

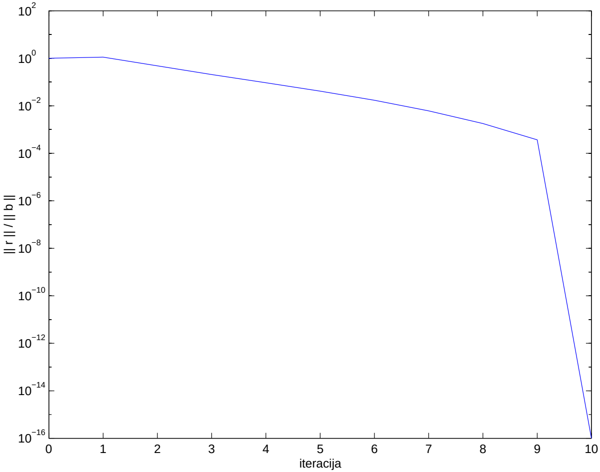
Za početnu iteraciju uzet ćemo $x_0 = [0\ 0\ \ldots\ 0]^T$*, a za desnu stranu sustava,* b *je određen tako da rješenje sustava bude jednako* $x = [1\ 1\ \ldots\ 1]^T$*, odnosno da je* $b = A \cdot x$*.*
Napišite program koji riješava ovaj sustav, pomoću metode konjugiranih gradijenata i u svakom koraku k *kontrolirajte relativnu normu reziduala* $\|r_k\|_2 / \|b\|_2$*. Iteriranje se treba zaustaviti kada je ona manja od* $tol = 10^{-8}$*.*



Slika: Relativne norme reziduala u svakoj iteraciji metode konjugiranih gradijenata, za matricu A iz prethodnog zadatka.

Zadatak

Situacija u ovom zadatku je slična prethodnom, samo što pozitivno definitna matrica A ima deset različitih svojstvenih vrijednosti, svaka od njih kratnosti 10. Dakle, $A = Q\Lambda Q^T$, gdje je Λ dijagonalna matrica svojstvenih vrijednosti $\lambda(A) \in \{1, 2, \ldots, 10\}$, a Q slučajna ortogonalna matrica. Uvjetovanost matrice A iznosi $\kappa(A) = 10$. b i x_0 se određuju kao u prethodnom zadatku. Napišite program koji riješava ovaj sustav, pomoću metode konjugiranih gradijenata i u svakom koraku k kontrolirajte relativnu normu reziduala $\|r_k\|_2/\|b\|_2$. Iteriranje se treba zaustaviti kada je ona manja od $tol = 10^{-8}$.



Slika: Relativne norme reziduala u svakoj iteraciji metode konjugiranih gradijenata, za matricu A iz prethodnog zadatka.

Kako rezultati ova dva zadatka potvrđuju iskaz Teorema na str. 53?

Prekondicionirana metoda konjugiranih gradijenata

- Prekondicioniranje je bilo kakvo modificiranje originalnog linearnog sustava, koje na neki način olakšava rješavanje danog sustava, npr. **ubrzava konvergenciju**.
- Modificirani sustav ima isto rješenje, ali ima bolja svojstva, npr. **bolja spektralna svojstva matrice sustava**.
- *Matrica prekondicioniranja* je matrica koja utječe na transformaciju sustava.
- Ako matrica M aproksimira matricu sustava A na neki način, modificirani sustav glasi

$$M^{-1}Ax = M^{-1}b$$

- U slučaju da je matrica A simetrična, tada se od matrice M može zahtijevati da bude simetrična i pozitivno definitna.
- Matrica M se može onda faktorizirati npr. metodom Choleskog na $M = R^T R$, i onda možemo definirati i *dvostrano* prekondicioniranje pomoću faktora, pri čemu se tada rješava sustav

$$R^{-T}AR^{-1}y = R^{-T}b, \qquad x = R^{-1}y$$

- Matrica prekondicioniranog sustava $R^{-T}AR^{-1}$ ostaje simetrična.
- Matrice $M^{-1}A$ i $R^{-T}AR^{-1}$ imaju iste svojstvene vrijednosti, jer su slične.

Odabir matrice prekondicioniranja:

- Za bilo koju simetričnu pozitivno definitnu $n \times n$ matricu $A = [a_{ij}]$, **dijagonalna matrica prekondicioniranja** dana je sa $D = \mathrm{diag}(\sqrt{a_{11}^{-1}}, \ldots, \sqrt{a_{nn}^{-1}})$ (prekondicionirana matrica: DAD)
- Drugi način odabira matrice prekondicioniranja su **nekompletne faktorizacije**:
  - tokom samog procesa faktorizacije određeni se elementi zanemaruju
  - to na primjer mogu biti elementi u kojima originalna matrica sustava ima nulu
  - takve se matrice prekondicioniranja uvijek ostavljaju u faktoriziranom obliku
  - njihova efikasnost ovisi o tome kako dobro njihov inverz aproksimira A^{-1}
  - za simetrične pozitivno definitne matrice možemo primijeniti **nekompletnu faktorizaciju Choleskog**

Algoritam (Nekompletna faktorizacija Choleskog (IC))

$$
\begin{array}{l}
\textbf{\textit{for}}\ (i = 0; i < n; i++)\{ \\
\quad \textbf{\textit{for}}\ (k = 0; k < i; k++) \\
\quad\quad A[i][i] = A[i][i] - pow(A[k][i], 2); \\
\quad A[i][i] = sqrt(A[i][i]); \\
\quad \textbf{\textit{for}}\ (j = i+1; j < n; j++)\{ \\
\quad\quad \textbf{\textit{if}}\ (A[i][j] != 0)\{ \\
\quad\quad\quad \textbf{\textit{for}}\ (k = 0; k < i; k++) \\
\quad\quad\quad\quad A[i][j] = A[i][j] - A[k][i] * A[k][j]; \\
\quad\quad\quad A[i][j] = A[i][j] / A[i][i]; \\
\quad\quad \} \\
\quad \} \\
\}
\end{array}
$$

Algoritam (Prekondicionirana metoda konjugiranih gradijenata (PCG))

x_0 *zadan;*
$r_0 = b - Ax_0;$
riješi $Mp_0 = r_0;$
$d_0 = p_0;$
$k = 0;$
while (!*kriterij_zaustavljanja*){

$$\alpha_k = \frac{r_k^T p_k}{d_k^T A d_k};$$
$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k d_k;$$
$$r_{k+1} = r_k - \alpha_k A d_k;$$
riješi $Mp_{k+1} = r_{k+1};$
$$\beta_{k+1} = \frac{r_{k+1}^T p_{k+1}}{r_k^T p_k};$$
$$d_{k+1} = p_{k+1} + \beta_{k+1} d_k;$$
$$k = k + 1;$$

}

Zadaci

Zadatak

Napišite potprogram `pcg()` *koji implementira prekondicioniranu metodu konjugiranih gradijenata pomoću nekompletne faktorizacije Choleskog. Potprogram* `ic()` *koji implementira nekompletnu faktorizaciju Choleskog nalazi se u datoteci* `ic.c` *na adresi*

`http://www.math.hr/~nela/zr1.html`

Ulazni parametri neka su

- *dimenzija problema n*
- *matrica A i vektor b*
- *početna iteracija x_0*
- *tolerancija tol*

Zadatak (nastavak)

Kriterij zaustavljanja je $\|r_k\|_2/\|b\|_2 \leq tol$, gdje je $r_k = b - Ax_k$. Koristite BLAS potprogram

- `dtrsv_()` *za rješavanje sustava sa trokutastom matricom.*

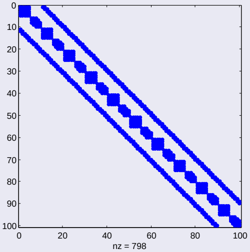
U algoritmu linija `riješi` $Mp_{k+1} = r_{k+1}$*; znači da za izračunati nekompletni faktor Choleskoga R računamo:*

1. $s_{k+1} = R^{-T} r_{k+1}$
2. $p_{k+1} = R^{-1} s_{k+1}$

jer $M = R^T R$, a $M^{-1} = R^{-1} R^{-T}$.

Zadatak

Matrica sustava ovog primjera je rijetko popunjena Stieltjesova matrica, čiji raspored netrivijalnih elemenata je dan u Slici.

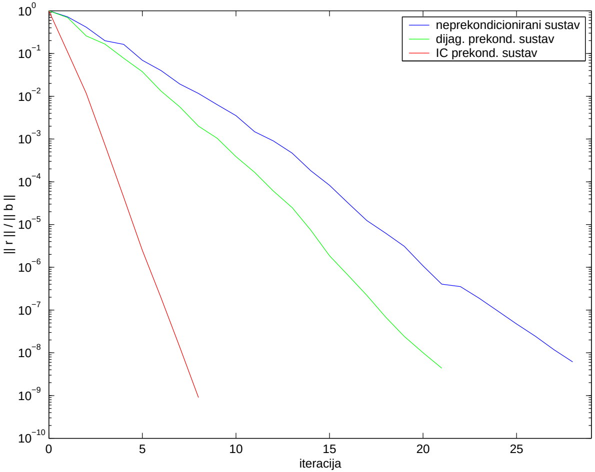


Svojstvene vrijednosti ove matrice nalaze se u intervalu $\lambda(A) \in \langle 3.23, 47.07 \rangle$, i mnoge su vrlo blizu jedne drugima, a uvjetovanost iznosi $\kappa(A) = 14.5627$.

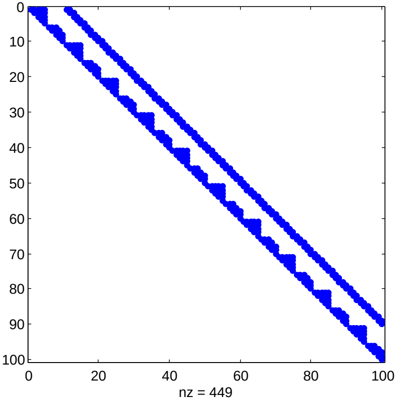
Zadatak (nastavak)

Prekondicioniranje nekompletnom faktorizacijom Choleskog ćemo usporediti sa dijagonalnim prekondicioniranjem, i sa originalnim sustavom bez prekondicioniranja, kada se rješavaju pomoću metode konjugiranih gradijenata. Vektor desne strane b je izračunat tako da je egzaktno rješenje $x = [1, 1, \ldots, 1]^T$*, a* $x_0 = [0, 0 \ldots, 0]$*. Odnosi između uvjetovanosti i broja iteracija potrebnih za postizanje iste točnosti od* $tol = 10^{-8}$ *tih triju sustava, dani su u sljedećoj tablici.*

	neprekondicionirani sustav	**dijagonalno prekondicionirani sustav**	**IC prekondicionirani sustav**
$\kappa(A)$	14.5627	7.8162	1.5025
k	28	21	8



Slika: Relativne norme reziduala u svakoj iteraciji prekondicionirane metode konjugiranih gradijenata, za matricu iz prethodnog zadatka.



Slika: Raspored netrivijalnih elemenata nekompletnog faktora Choleskog matrice iz prethodnog zadatka.

GMRES metoda

- *GMRES metoda* (Generalized minimal residual algorithm) može se primijeniti na sve vrste matrica.
- koristi modificirani Gram–Schmidtov postupak kako bi konstruirao ortonormiranu bazu $\{q_1, q_2, \ldots, q_{k+1}\}$ za niz Krylovljevih potprostora

$$\mathrm{span}\{r_0, Ar_0, \ldots, A^k r_0\},$$

$\longrightarrow$ *Arnoldijev algoritam*.

Algoritam (Arnoldijev algoritam)

q_1 *sa* $\|q_1\|_2 = 1$ *zadan;*

for $(j = 1; j <= n-1; j++)\{$

$\quad \tilde{q}_{j+1} = Aq_j;$

$\quad$ **for** $(i = 1; i <= j; j++)\{$

$\qquad h_{i,j} = q_i^T \tilde{q}_{j+1};$

$\qquad \tilde{q}_{j+1} := \tilde{q}_{j+1} - h_{i,j} q_i;$

$\quad \}$

$\quad h_{j+1,j} = \|\tilde{q}_{j+1}\|_2;$

$$q_{j+1} = \frac{\tilde{q}_{j+1}}{h_{j+1,j}};$$

$\}$

- Za ortogonalnu matricu

$$Q_k = [\ q_1 \quad q_2 \quad \cdots \quad q_k\ ],$$

i $(k+1) \times k$ gornje Hessenbergovu matricu

$$H_{k+1,k} = [h_{ij}], \quad i = 1, \ldots, k+1, \ j = 1, \ldots, k$$

iz Arnoldijevog algoritma vrijedi

$$AQ_k = Q_{k+1} H_{k+1,k}.$$

- GMRES metoda u svakom koraku računa aproksimaciju rješenja $x_k = x_0 + Q_k y_k$, takvu da je $x_k \in x_0 + \mathcal{K}_k(A, r_0)$ sa minimalnom 2-normom reziduala.

Algoritam (GMRES metoda)

x_0 *zadan;*
$r_0 = b - Ax_0;$
$\beta = \|r_0\|_2;$
$q_1 = \dfrac{r_0}{\beta};$
$l = [1, 0, \ldots, 0]^T;$
for $(k = 1; k <= k_{max}; k++)$
  Izračunaj q_{k+1} *i* $h_{i,k}$ *za* $i = 1, \ldots, k+1$,
    koristeći Arnoldijev algoritam.
  Primijeni $F_1, \ldots, F_{k-1}$ *na zadnji stupac od* H*:*
    for $(i = 1; i <= k-1; i++)\{$

$$\begin{bmatrix} h_{i,k} \\ h_{i+1,k} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_i & s_i \\ -\bar{s}_i & c_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h_{i,k} \\ h_{i+1,k} \end{bmatrix};$$

  $\}$

Algoritam (GMRES metoda — nastavak)

Izračunaj k-tu Givensovu rotaciju F_k kako bi se poništio $h_{k+1,k}$:

$$c_k = \frac{|h_{k,k}|}{\sqrt{|h_{k,k}|^2 + |h_{k+1,k}|^2}};$$

if $c_k \neq 0$

$$s_k = c_k \frac{\overline{h_{k+1,k}}}{\overline{h_{k,k}}};$$

else

$$s_k = 1;$$

Primijeni k-tu rotaciju na l i na zadnji stupac od H:

$$\begin{bmatrix} l_k \\ l_{k+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_k & s_k \\ -\bar{s}_k & c_k \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_k \\ 0 \end{bmatrix};$$

$$h_{k,k} = c_k h_{k,k} + s_k h_{k+1,k};$$

$$h_{k+1,k} = 0;$$

}

Algoritam (GMRES metoda — nastavak)

if *(ocjena norme reziduala $\beta|l_{k+1}|$ dovoljno mala)*

Riješi gornje trokutasti sustav $H_{k\times k}y_k = \beta l_{k\times 1}$.

$x_k = x_0 + Q_k y_k$;

}

Neka svojstva GMRES metode

Teorem

- *Rezidual u k-tom koraku zadovoljava*

$$\begin{aligned} r_k =& b - Ax_k = Q_{k+1}(\beta\xi_1 - H_{k+1,k}y_k) \\ =& Q_{k+1}F^{(k)*}(g^{(k)}[k+1]\xi_{k+1}), \end{aligned}$$

pri čemu su ξ_1 prvi jedinični vektor $\xi_1 = [1, 0, \dots, 0]^T$, $F^{(k)} = F_k F_{k-1} \cdots F_0$, a $g^{(k)} = \beta F^{(k)}\xi_1$. Kao rezultat dobivamo

$$\|r_k\|_2 = \|b - Ax_k\|_2 = |g^{(k)}[k+1]|.$$

- *Neka je A regularna matrica. Tada se GMRES algoritam prekida u k-tom koraku ($H[k+1][k] = 0$) za $k \le n$ ako i samo ako je aproksimacija x_k jednaka egzaktnom rješenju.*

Konvergencija GMRES metode

Teorem

Neka je x_k aproksimacija rješenja ostvarena u k-tom koraku GMRES algoritma, i neka je $r_k = b - Ax_k$. Tada postoji $q_{k-1} \in \mathbb{P}_{k-1}$ takav da je x_k oblika

$$x_k = x_0 + q_{k-1}(A)r_0$$

i

$$\|r_k\|_2 = \min_{q_{k-1} \in \mathbb{P}_{k-1}} \|(I - Aq_{k-1}(A))r_0\|_2.$$

Teorem

Neka je dan nerastući niz $f(0) \geq f(1) \geq \cdots \geq f(n-1) > 0$ pozitivnih brojeva i skup kompleksnih brojeva različitih od nule $\{\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n\}$, tada postoji matrica A sa svojstvenim vrijednostima $\lambda_1, \lambda_2, \ldots, \lambda_n$ i desna strana sustava b sa $\|b\|_2 = f(0)$ takvi da reziduali r_k u svakom koraku GMRES algoritma primijenjenog na sustav $Ax = b$ sa $x_0 = 0$, zadovoljavaju $\|r_k\|_2 = f(k)$, $k = 1, 2, \ldots, n-1$.

Zadaci

Za rješavanje linearnih sustava pomoću GMRES metode koristit ćemo gotovi potprogram `GMRES.c` koji se nalazi na adresi

http://www.math.hr/~nela/zr1.html

Ovaj potprogram deklariran je sa

```
int gmres_(integer *n, doublereal *b,
doublereal *x, integer *restrt, doublereal
*work, integer *ldw, doublereal *h, integer
*ldh, integer *iter, doublereal *resid, int
(*matvec) (doublereal *, doublereal *,
doublereal *, doublereal *), int (*psolve)
(doublereal *, doublereal *), integer *info)
```

pri čemu su

`n`	(ulaz) red matrice A
`b`	(ulaz) vektor desne strane b
`x`	(ulaz) početna iteracija
	(izlaz) aproksimacija rješenja
`restrt`	(ulaz) broj iteracija kod restarta ($\leq n$)
`work`	pomoćno polje dimenzija $ldw \times (restrt + 4)$.
`ldw`	(ulaz) vodeća dimenzija polja *work*, $ldw \geq n$
`h`	pomoćno polje dimenzija $ldh \times (restrt + 2)$
	za spremanje matrice H i Givensovih rotacija
`ldh`	(ulaz) vodeća dimenzija polja h, $ldh \geq restrt + 1$.
`iter`	(ulaz) maksimalan broj iteracija
	(izlaz) broj izvršenih iteracija
`resid`	(ulaz) kriterij zaustavljanja; tolerancija na $\|b-Ax\|/\|b\|$
	(izlaz) konačna vrijednost od $\|b-Ax\|/\|b\|$

`matvec` potprogram za računanje produkta matrica–vektor
$y = \alpha \cdot A \cdot x + \beta \cdot y$,
gdje su α i β skalari, x i y vektori, a A matrica.
Poziv potprograma:
`matvec (&alpha, x, &beta, y)`

`psolve` potprogram za rješavanje sustava sa matricom prekondicioniranja
$Mx = b$,
gdje su x i b vektori, a M matrica. b se ne mijenja.
Poziv potprograma:
`psolve (x, b)`

`info` (izlaz) informacija o izvršavanju potprograma (0=OK)

Zadatak

U ovom zadatku promatramo GMRES metodu, i pokazat ćemo da se zaista može konstruirati matrica sa u naprijed određenom krivuljom konvergencije, za bilo koji skup svojstvenih vrijednosti. Definirat ćemo

- *skup svojstvenih vrijednosti* $\lambda(A) \in \{e^{\frac{2\pi i}{100}k} : k = 0, 1, \ldots, 99\}$,
- *niz vrijednosti* $f(0) = 100$, $f(1) = 99$, $f(2) = 98, \ldots, f(99) = 1$, $f(100) = 0$,
- $$g(k) = \sqrt{(f(k-1))^2 - (f(k))^2} = \sqrt{(100-k+1)^2 - (100-k)^2}, \quad k = 1, \ldots, 100.$$
- *Matrica* $V = [v_1 \; v_2 \; \cdots \; v_{100}]$ *je slučajna ortogonalna matrica,*

Zadatak (nastavak)

- *definirajmo* $b = \sum_{i=1}^{100} g(i)v_i$, *i tada je* $\|b\|_2 = f(0)$.
- *Definirajmo matricu* $B = [b\ v_1\ \cdots\ v_{99}]$
- *izračunajmo koeficijente polinoma*

$$a(z) = z^{100} - \sum_{i=0}^{99} \alpha_i z^i = (z - \lambda_1(A)) \cdots (z - \lambda_{100}(A)),$$

u našem slučaju je $a(z) = z^{100} - 1$, *odnosno*

$$\alpha_0 = 1, \quad \alpha_1 = \alpha_2 = \cdots = \alpha_{99} = 0,$$

jer se radi o stotim korijenima jedinice.

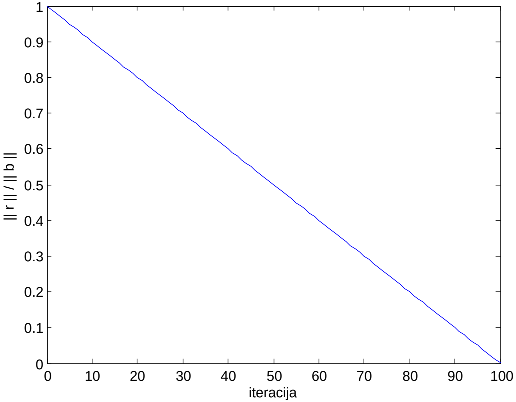
- *konstruirajmo matricu A kao*

Zadatak (nastavak)

$$A = B \cdot \begin{bmatrix} 0 & \cdots & 0 & \alpha_0 \\ 1 & \cdots & 0 & \alpha_1 \\ & \ddots & \vdots & \vdots \\ & & 1 & \alpha_{99} \end{bmatrix} \cdot B^{-1}.$$

- *Početna iteracija je $x_0 = 0$, i $tol = 10^{-5}$.*

Prema teoretskim rezultatima, ovako definirani sustav $Ax = b$ ima matricu sa gore definiranim svojstvenim vrijednostima i sa rezidualima, takvim da nakon svake iteracije GMRES metode vrijedi $\|r_k\|_2 = f(k)$. Provjerite to tako da ispišete normu reziduala u svakom koraku. Također, provjerite da li kreirana matrica ima tražene svojstvene vrijednosti pozivom CLAPAK potprograma `dgeev()`*, i to tako da izračunate svojstvene vrijednosti potencirate na 100-tu i usporedite sa jedinicama.*



Slika: Relativne norme reziduala u svakoj iteraciji GMRES metode, za matricu A iz prethodnog zadatka.

Primjeri iz primjene

Mnoge matrice dobivene iz primjene su takozvane *M matrice*.

Definicija

Za $n \times n$ matricu A kažemo da je M-matrica ako

(i) $a_{ii} > 0,\ i = 1, \ldots, n,$

(ii) $a_{ij} \leq 0,\ i, j = 1, \ldots, n,\ j \neq i$, i

(iii) *A je regularna i $A^{-1} \geq 0$.*

U sljedećem teoremu nalaze se ostale ekvivalentne tvrdnje, prema kojima možemo prepoznati M-matricu

Teorem

Neka je A realna $n \times n$ matrica sa nepozitivnim vandijagonalnim elementima. Sljedeće tvrdnje su ekvivalentne:

(i) *A je M-matrica.*

(ii) *A je regularna i $A^{-1} \geq 0$.*

(iii) *Sve svojstvene vrijednosti od A imaju pozitivan realni dio.*

(iv) *Svaka realna svojstvena vrijednost od A je pozitivna.*

(v) *Sve glavne minore od A su M-matrice.*

(vi) *A se može faktorizirati u oblik $A = LU$, gdje je L donje trokutasta, U gornje trokutasta, a svi dijagonalni elementi obaju matrica su pozitivni.*

(vii) *Dijagonalni elementi od A su pozitivni, i AD je strogo dijagonalno dominanatna za proizvoljnu pozitivnu, dijagonalnu matricu D.*

Definicija

Realna matrica A je Stieltjesova matrica ako je A simetrična, pozitivno definitna i svi vandijagonalni elementi od A su nepozitivni.

Teorem

Svaka Stieltjesova matrica je M-matrica.

Korolar

Ako je matrica sustava A M-matrica, tada

- *Jacobijeva i Gauss–Seidelova metoda konvergiraju za svaku početnu iteraciju,*
- *Stopa konvergencije Gauss–Seidelove metode je najmanje tako dobra kao stopa Jacobijeve metode.*

Ekonomski "input–output" model

Primjer

Ovo je jednostavan model otvorene ekonomije koja se sastoji od tri sektora, koji opskrbljuju jedan drugoga i potrošače. Pretpostavimo da su ta tri sektora:

- *(M)aterijali*
- *(P)roizvodnja*
- *(U)sluga*

i pretpostavimo da je potražnja jednog sektora u odnosu na sve ostale sektore proporcionalna njegovom izlazu ("output"-u).

- *Tablica koeficijenata proporcionalnosti potražnje za proizvodnjom jedne jedinice "outputa" sektora naziva se matricom potrošnje.*
- *Ravnoteža ekonomije postiže se kad se ukupna proizvodnja poklapa sa potražnjom.*

Primjer (nastavak)

- *Neka je zadana sljedeća matrica potrošnje*

$$\begin{array}{cc} & \textit{potrošeno od} \\ & \begin{array}{ccc} M & P & U \end{array} \\ \textit{proizvedeno od} \begin{array}{c} M \\ P \\ U \end{array} & \begin{array}{|c|c|c|} \hline 0.2 & 0.3 & 0.1 \\ \hline 0.1 & 0.3 & 0.2 \\ \hline 0.4 & 0.2 & 0.1 \\ \hline \end{array} \end{array}$$

- *i neka je potražnja kupaca za "otput"-ima sektora M, P i U dana konstantama 20, 10, i 30 jedinica.*
- *Ravnoteža ekonomije se izražava kao sustav jednadžbi, pri čemu su x, y, z ukupni "output"-i sektora M, P i U.*
- *Npr. za sektor M, ukupni "output" tj. proizvodnja je x jedinica, potražnja za proizvodima sektora M od strane tri sektora M, P, i U su $0.2x$, $0.3y$ i $0.1z$, a potrošači potražuju 20 jedinica.*

Primjer (nastavak)

- *Kako bismo uravnotežili “input”/“output” svih sektora na kraju dobivamo sustav od tri jednadžbe sa tri nepoznanice:*

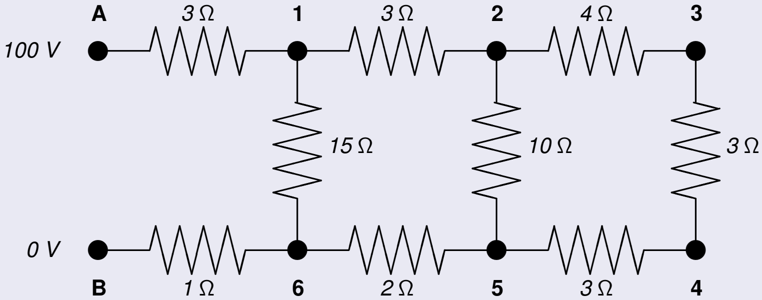
$$
\begin{aligned}
x &= 0.2x + 0.3y + 0.1z + 20 \\
y &= 0.1x + 0.3y + 0.2z + 10 \\
z &= 0.4x + 0.2y + 0.1z + 30
\end{aligned}
$$

- *Pitanje koje zanima ekonomiste je da li ovaj sustav ima rješenje, i ako ga ima, kako ga mogu interpretirati.*

Električna mreža

Primjer

Problem od kojeg polazimo je računanje potencijala u električnoj mreži prikazanoj na slici.



- *Otpori u otpornicima su dani na slici, a razlika potencijala izmedu točaka* **A** *i* **B** *je 100 V.*

Primjer (nastavak)

- *Iz Ohmovog zakona slijedi da je jakost struje I_{pq} koja struji od točke p do točke q u grani mreže pq, dana sa*

$$I_{pq} = \frac{v_p - v_q}{R_{pq}},$$

  gdje su v_p i v_q potencijali u točkama p i q, a R_{pq} je otpor grane pq.
- *Prema Kirchoffovom zakonu, suma jakosti struja koje završavaju u jednom čvoru mora biti jednaka nuli, i to vrijedi za svaki čvor mreže.*
- *To je zapravo zakon sačuvanja naboja, i on ukazuje na to da se struja ne može akumulirati niti generirati u bilo kojem čvoru mreže.*

Primjer (nastavak)

- *Primjena tih dvaju zakona na čvor* **1** *vodi do sljedeće jedadžbe*

$$I_{A1} + I_{21} + I_{61} = \frac{100 - v_1}{3} + \frac{v_2 - v_1}{3} + \frac{v_6 - v_1}{15} = 0$$

ili u sređenom obliku

$$11v_1 - 5v_2 - v_6 = 500.$$

- *Na sličan način mogu se napisati jednažbe za svaki preostali čvor u mreži, čime dobivamo sustav od 6 jedadžbi, sa 6 nepoznanica.*

Primjer (nastavak)

- *Nepoznanice su v_i, $i = 1, \ldots, 6$, potencijali u čvorovima.*

$$
\begin{array}{rcrcrcrcrcrcr}
11v_1 & - & 5v_2 & & & & & & & - & v_6 & = & 500 \\
-20v_1 & + & 41v_2 & - & 15v_3 & & & - & 6v_5 & & & = & 0 \\
 & - & 3v_2 & + & 7v_3 & - & 4v_4 & & & & & = & 0 \\
 & & & - & v_3 & + & 2v_4 & - & v_5 & & & = & 0 \\
 & - & 3v_2 & & & - & 10v_4 & + & 28v_5 & - & 15v_6 & = & 0 \\
-2v_1 & & & & & & & - & 15v_5 & + & 47v_6 & = & 0
\end{array}
$$

- *Problem smo sveli na rješavanje sustava, kojeg matrično možemo zapisati kao $Av = b$, pri čemu je $A \in \mathbb{R}^{6\times 6}$ matrica, a $v, b \in \mathbb{R}^6$ vektori, i oni su oblika*

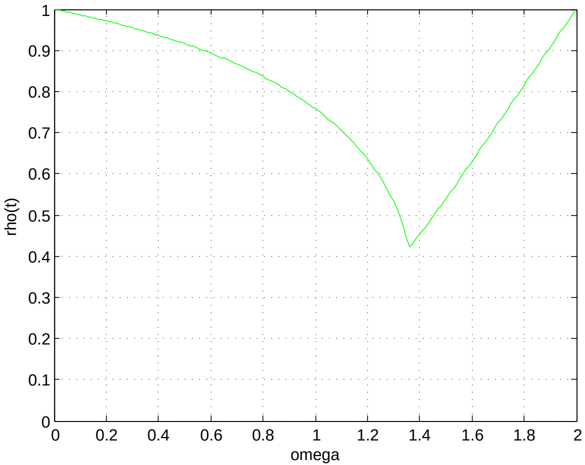
$$
\begin{bmatrix}
11 & -5 & 0 & 0 & 0 & -1 \\
-20 & 41 & -15 & 0 & -6 & 0 \\
0 & -3 & 7 & -4 & 0 & 0 \\
0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\
0 & -3 & 0 & -10 & 28 & -15 \\
-2 & 0 & 0 & 0 & -15 & 47
\end{bmatrix}
\begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ v_4 \\ v_5 \\ v_6 \end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix} 500 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.
$$

Primjer (nastavak)

- *Matrica A je M matrica prema kriteriju (vii), jer za* $\Delta = diag(0.4, 0.7, 0.9, 1, 1, 0.5)$

$$A \cdot \Delta = \begin{bmatrix} 4.4 & -3.5 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & -0.5 \\ -8.0 & 28.7 & -13.5 & 0.0 & -6.0 & 0.0 \\ 0.0 & -2.1 & 6.3 & -4.0 & 0.0 & 0.0 \\ 0.0 & 0.0 & -0.9 & 2.0 & -1.0 & 0.0 \\ 0.0 & -2.1 & 0.0 & -10.0 & 28.0 & -7.5 \\ -0.8 & 0.0 & 0.0 & 0.0 & -15.0 & 23.5 \end{bmatrix}$$

  je strogo dijagonalno dominantna.
- *Prema teoremu o konvergenciji Jacobijeve i Gauss–Seidelove metode za M matrice, možemo koristiti te dvije metode za računanje aproksimativnog rješenja sustava $Av = b$.*



Slika: Spektralni radijus SOR matrice iteracije za matricu A.

Primjer (nastavak)

- *Sustav ćemo rješavati Gauss–Seidelovom, SOR metodom i GMRES metodom.*
- *Za sve metode neka je*
  - $v^{(0)} = [0\ 0\ 0\ 0\ 0\ 0]^T$.
  - *Kriterij zaustavljanja:* $\|b - Av^{(k)}\|_2 / \|b\|_2 \leq 10^{-8}$.
- *Za SOR metodu treba uzeti optimalan parametar* $\omega = 1.35$.

Primjer (nastavak)

- *Rješenje sustava je*

$$v = \begin{bmatrix} 70 \\ 52 \\ 40 \\ 31 \\ 22 \\ 10 \end{bmatrix}$$

- *Tražena točnost dostiže se za:*

Gauss–Seidel	*65 iteracija*
SOR	*23 iteraciju*
GMRES	*6 iteracija*

Numeričko rješavanje obične diferencijalne jednadžbe

Primjer

Numerički ćemo riješiti jednu konkretnu običnu diferencijalnu jednadžbu (rubni problem), i usporediti dobiveno rješenje sa egzaktnim rješenjem jednadžbe.

- *Imamo sljedeći problem:*

$$\begin{aligned} -\frac{d^2}{dx^2}y(x) - y(x) &= 2\sin(x), \quad x = \langle 0, 1\rangle, \\ y(0) &= 0 \\ y(1) &= \cos(1) \end{aligned}$$

- *Lako se može provjeriti da je egzaktno rješenje dano sa*

$$y(x) = x\cos(x).$$

Primjer (nastavak)

- *Numerički rješenje možemo približno odrediti aproksimacijom na dovoljno gustoj mreži definiranoj na* $[0,1]$, *i to se zove* **diskretizacija**.
- *Gledamo ekvidistantnu mrežu od 101 točke i definiramo*

$$h = 0.01, \quad x_i = ih, \quad y_i \approx y(x_i), \quad f_i = 2\sin x_i,$$

$$i = 0, 1, \ldots, 100.$$

- *Derivaciju možemo aproksimirati na dva načina:*
  - ***diferencijom unazad***

$$y'(ih) \approx \frac{y(ih) - y((i-1)h)}{h} = \frac{y_i - y_{i-1}}{h},$$

Primjer (nastavak)

- ***diferencijom unaprijed***

$$y'(ih) \approx \frac{y((i+1)h) - y(ih)}{h} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}.$$

- *Druga derivacija se najčešće aproksimira kombinacijom ovih dviju diferencija, i tako dobivena aproksimacija zove se* ***centralna diferencija****:*

$$y''(ih) \approx \frac{\frac{y((i+1)h)-y(ih)}{h} - \frac{y(ih)-y((i-1)h)}{h}}{h} = \\ = \frac{y((i+1)h) - 2y(ih) + y((i-1)h)}{h^2} = \\ = \frac{y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1}}{h^2}.$$

Primjer (nastavak)

- *Uvrstimo li to u problem, dobivamo aproksimativni linearni sustav sa nepoznanicama* $y_0, \ldots, y_{100}$

$$\begin{aligned} y_0 &= 0 \\ \frac{-y_{i-1} + 2y_i - y_{i+1}}{h^2} - y_i &= f_i, \quad i = 1, \ldots, 99 \\ y_{100} &= \cos(1). \end{aligned}$$

- *Kad to sredimo dobit ćemo 99 jednadžbi*

$$\begin{aligned} (2 - h^2)y_1 - y_2 &= h^2 f_1 \\ -y_{i-1} + (2 - h^2)y_i - y_{i+1} &= h^2 f_i, \quad i = 2, \ldots, 98 \\ -y_{98} + (2 - h^2)y_{99} &= h^2 f_{99} + y_{100}, \end{aligned}$$

Primjer (nastavak)

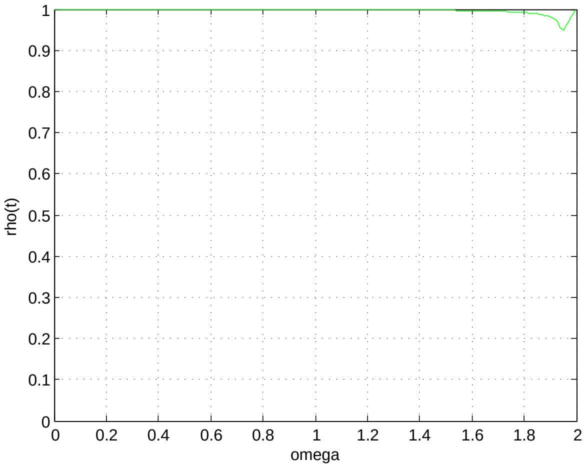
- *Dobili smo sustav $Ay = b$, sa $A \in \mathbb{R}^{99\times 99}$ i $b, y \in \mathbb{R}^{99}$, pri čemu su*

$$A = \begin{bmatrix} 1.9999 & -1 & & & & \\ -1 & 1.9999 & -1 & & & \\ & & \cdots & \cdots & \cdots & \\ & & & -1 & 1.9999 & -1 \\ & & & & -1 & 1.9999 \end{bmatrix},$$

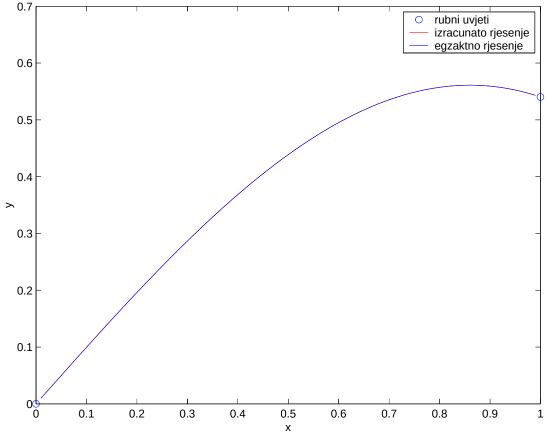
$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{98} \\ y_{99} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} 0.0002\sin(0.01) \\ 0.0002\sin(0.02) \\ \vdots \\ 0.0002\sin(0.98) \\ 0.0002\sin(0.99) + \cos(1) \end{bmatrix}.$$

Primjer (nastavak)

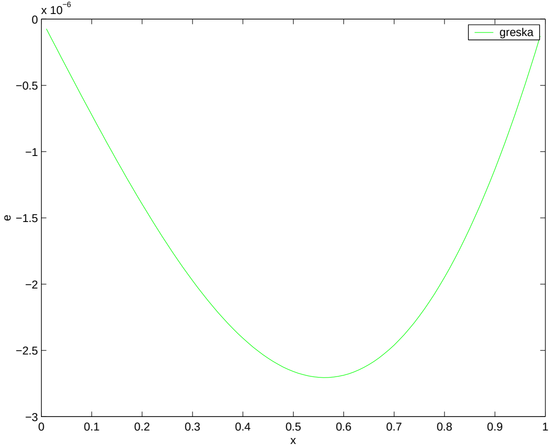
- *Lako možemo provjeriti da je matrica A pozitivno definitna pomoću faktorizacije Choleskog.*
- *U CLAPACK-u treba pozvati potprogram* `dpotrf_()` *koji računa faktorizaciju Choleskog i provjeriti što vraća varijabla* `info`*:*
  - *ukoliko je* `info`$= 0$ *matrica je pozitivno definitna*
  - *ukoliko je* `info`> 0 *matrica nije pozitivno definitna*
- *Njezina uvjetovanost je* $\kappa_2(A) = 4.5090 \cdot 10^3$.
- *Sustav ćemo rješavati Gauss–Seidelovom, SOR metodom i metodom konjugiranih gradijenata.*
- *Za sve metode neka je*
  - $y^{(0)} = [0\ 0\ 0\ \cdots\ 0]^T$.
  - *Kriterij zaustavljanja:* $\|b - Ay^{(k)}\|_2 / \|b\|_2 \leq 10^{-8}$.
- *Za SOR metodu treba uzeti optimalan parametar* $\omega = 1.95$.



Slika: Spektralni radijus SOR matrice iteracije za matricu A.



Slika: Numeričko i egzaktno rješenje rubnog problema.



Slika: Greška $(y - \tilde{y})$ između egzaktnog i numeričkog rješenje rubnog problema u kojoj prevladava greška diskretizacije.

Primjer (nastavak)

- *Izračunatu aproksimaciju rješenja usporedite sa egzaktnim rješenjem, računanjem greške u čvorovima mreže.*
- *Tražena točnost dostiže se za:*

Gauss–Seidel	*15019 iteracija*
SOR	*400 iteracija*
CG	*99 iteracija*

Numeričko rješavanje Poissonove jednadžbe

Primjer

Numerički ćemo riješiti Poissonovu parcijalnu diferencijalnu jednadžbu (rubni problem), koja je specijalni oblik difuzijske jednadžbe (npr. distribucija temperature u objektu).

- *Imamo sljedeći problem:*

$$\begin{aligned} -\Delta u(x,y) &= f(x,y) & \text{na } \Omega \\ u(x,y) &= 0 & \text{na } \partial\Omega \end{aligned}$$

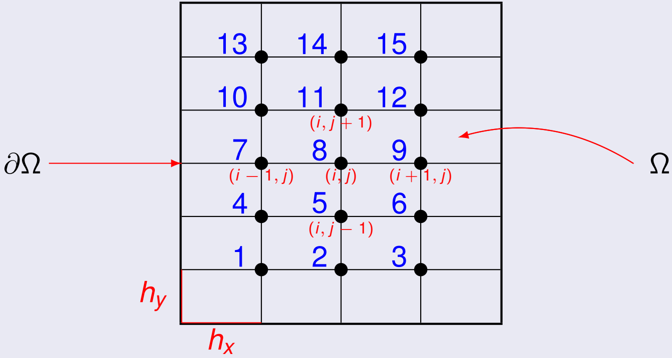
  gdje je Ω jedinični kvadrat $\langle 0,1\rangle \times \langle 0,1\rangle$.
- *Δ je Laplaceov operator*

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$$

- *a njegova diskretizacija se također provodi konačnim diferencijama.*

Primjer (nastavak)

- *Za metodu konačnih diferencija iz danog područja Ω izabran je skup točaka koji čini mrežu, i u svakoj točki mreže od Ω derivacija u Poissonovoj jednadžbi zamijenjuje se sa kvocijentom koji se približava pravoj derivaciji kada mreža postaje sve finija.*



Primjer (nastavak)

- *Uvedimo uniformnu mrežu*

$$\{x_i, y_j : \ i = 0, 1, \ldots, n_x + 1, j = 0, 1, \ldots, n_y + 1\}$$

na našem jediničnom kvadratu, sa koracima
  - $h_x = 1/(n_x + 1)$ *u* x *smjeru,*
  - *i* $h_y = 1/(n_y + 1)$ *u smjeru* y*,*

kao što je prikazano na prethodnoj slici za $n_x = 3$, $n_y = 5$.

- *Tada su*

$$x_0 = 0, \quad x_{n_x+1} = 1, \quad x_i = ih_x, \ i = 1, \ldots, n_x,$$

$$y_0 = 0, \quad y_{n_y+1} = 1, \quad y_j = jh_y, \ j = 1, \ldots, n_y.$$

Primjer (nastavak)

- *Dalje aproksimiramo druge derivacije centralnim diferencijama*

$$u_{i,j} \approx u(x_i, y_j),$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i-1,j} - 2u_{i,j} + u_{i+1,j}}{h_x^2},$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{h_y^2}$$

- *Ako definiramo* $f_{i,j} = f(x_i, y_j)$, *i ako centralne diferencije uvrstimo u Poissonovu jednadžbu umjesto derivacija, dobit ćemo aproksimativni sustav sa nepoznanicama* $u_{i,j}$, *za* $i = 1, \ldots, n_x$, $j = 1, \ldots, n_y$

Primjer (nastavak)

$$\frac{-u_{i-1,j}+2u_{i,j}-u_{i+1,j}}{h_x^2}+\frac{-u_{i,j-1}+2u_{i,j}-u_{i,j+1}}{h_y^2}=f_{i,j},$$

$$i=1,\ldots,n_x, j=1,\ldots,n_y,$$

gdje su

$$\begin{aligned} u_{0,j} &= u_{n_x+1,j}=0, \quad j=0,\ldots,n_y+1,\\ u_{i,0} &= u_{i,n_y+1}=0, \quad i=0,\ldots,n_x+1. \end{aligned}$$

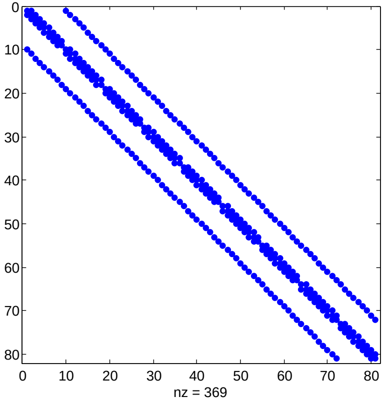
- *Matrica A dobivenog sustava je dimenzije $n_x n_y \times n_x n_y$ i ima poseban oblik poznat pod imenom **blok-TST** matrica*
  - **T** =*Toeplitzova (konstantna duž svih dijagonala)*
  - **S** =*simetrična*
  - **T** =*tridijagonalna*

Primjer (nastavak)

$$
A = \begin{array}{c c}
\begin{array}{ccccc} 1 & 2 & \cdots & n_y-1 & n_y \end{array} & \\
\begin{bmatrix}
S & T & & & \\
T & S & T & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & T & S & T \\
 & & & T & S
\end{bmatrix} &
\begin{array}{c} 1 \\ 2 \\ \vdots \\ n_y-1 \\ n_y \end{array}
\end{array}
$$

pri čemu su $S, T \in \mathbb{R}^{n_x \times n_x}$ *takve da je*

$$
T = -\frac{1}{h_y^2} I, \quad S = \begin{bmatrix}
\phi & \psi & & & \\
\psi & \phi & \psi & & \\
 & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & \psi & \phi & \psi \\
 & & & \psi & \phi
\end{bmatrix}, \quad
\begin{array}{l}
\phi = \frac{2}{h_x^2} + \frac{2}{h_y^2}, \\
\psi = -\frac{1}{h_x^2}
\end{array}
$$



Slika: Raspored netrivijalnih elemenata u matrici A dobivenoj diskretizacijom operatora $-\Delta$.

Primjer (nastavak)

- *vektor nepoznanica u i vektor desne strane b su oblika*

$$u = \begin{bmatrix} u_{1,1} \\ \vdots \\ u_{n_x,1} \\ u_{1,2} \\ \vdots \\ u_{n_x,n_y-1} \\ u_{1,n_y} \\ \vdots \\ u_{n_x,n_y} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} f_{1,1} \\ \vdots \\ f_{n_x,1} \\ f_{1,2} \\ \vdots \\ f_{n_x,n_y-1} \\ f_{1,n_y} \\ \vdots \\ f_{n_x,n_y} \end{bmatrix}.$$

Primjer (nastavak)

- *Mi ćemo rješavati stacionarnu difuzijsku jednadžbu s uniformnim toplinskim konduktivitetom materijala, s točkastim vanjskim izvorom topline u središtu kvadrata jačine 10000, i konstantnom temperaturom na rubu.*
- *Ovaj problem je ekvivalentan rješavanju Poissonove jednadžbe s funkcijom*

$$f(x,y) = \begin{cases} 0 & \text{za } (x,y) \in \Omega \setminus \{(0.5, 0.5)\} \\ 10000 & \text{za } (x,y) = (0.5, 0.5) \end{cases}$$

- *Za diskretizaciju, sada ćemo uzeti ekvidistantnu dvodimenzionalnu mrežu*

$$h = 0.1, \quad x_i = ih, \quad y_j = jh, \quad i,j = 0,1,\ldots,10,$$
$$u_{i,j} \approx u(x_i, y_j), \quad f_{i,j} = f(x_i, y_j).$$

Primjer (nastavak)

- *Matrica sustava* $A \in \mathbb{R}^{81\times 81}$ *je oblika*

$$A = 100 \cdot \begin{bmatrix} D & -I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -I & D & -I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -I & D & -I & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -I & D & -I & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -I & D & -I & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -I & D & -I & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -I & D & -I & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -I & D & -I \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -I & D \end{bmatrix}$$

pri čemu su $D,\ I \in \mathbb{R}^{9\times 9}$

Primjer (nastavak)

$$D = \begin{bmatrix} 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

a I je identiteta.

Primjer (nastavak)

- *Vektor desne strane $b \in \mathbb{R}^{81}$ je oblika*

$$b[i] = \begin{cases} 0 & za\ i = 1, \ldots, 40, 42, \ldots, 81 \\ 10000 & za\ i = 41 \end{cases}$$

- *Vektor nepoznanica $u \in \mathbb{R}^{81}$ je oblika*

$$u[k] = u_{i,j}, \quad k = (j-1) \cdot 9 + i.$$

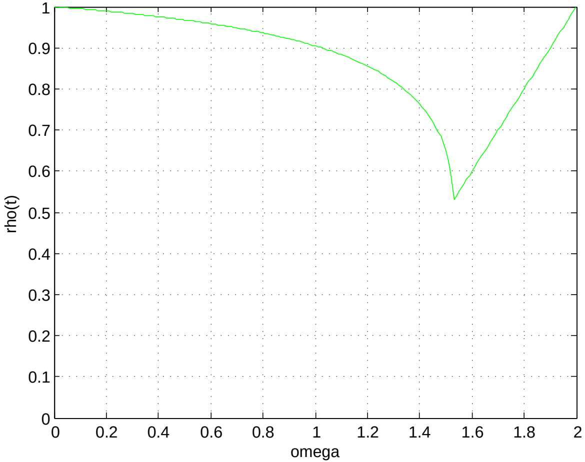
- ***Napomena:*** *U C-u imamo pomak u indeksima $b[i] \to b[i-1]$, $u[k] \to u[k-1]$ jer indeksi kreću od 0, pa je $b[40] = 10000$ i $b[i] = 0$ za $i \neq 40$.*
- *Rješavamo sustav $Au = b$, pri čemu je matrica A Stieltjesova.*

Primjer (nastavak)

- *Svojstvene vrijednosti od A su analitički poznate i iznose:*

$$\lambda_{i,j} = 400 \left(\sin^2\left(\frac{i\pi}{20}\right) + \sin^2\left(\frac{j\pi}{20}\right) \right)$$

- *Njezina uvjetovanost je $\kappa_2(A) = 39.8635$.*
- *Sustav ćemo rješavati Gauss–Seidelovom, SOR metodom i metodom konjugiranih gradijenata.*
- *Za sve metode neka je*
  - $u^{(0)} = [0\ 0\ 0\ \cdots\ 0]^T$.
  - *Kriterij zaustavljanja:* $\|b - Au^{(k)}\|_2 / \|b\|_2 \leq 10^{-8}$.
- *Za SOR metodu treba uzeti optimalan parametar $\omega = 1.53$.*



Slika: Spektralni radijus SOR matrice iteracije za matricu *A*.

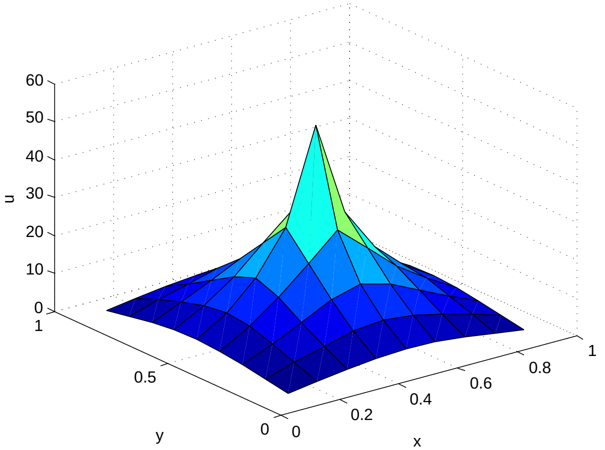
Primjer (nastavak)

- *Rješenje ispišite kao matricu po recima, u obliku*

$$\begin{matrix} u_{1,1} & u_{2,1} & \cdots & u_{9,1} \\ u_{1,2} & u_{2,2} & \cdots & u_{9,2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_{1,9} & u_{2,9} & \cdots & u_{9,9} \end{matrix}$$

- *Tražena točnost dostiže se za:*

Gauss–Seidel	*169 iteracija*
SOR	*33 iteracija*
CG	*13 iteracija*



Slika: Aproksimativno rješenje Poissonove jednadžbe.