НИУ ИТМО
Факультет Информационных Технологий и Программирования
Направление "Прикладная Математика и Информатика"

Лабораторная работа 3

курса “Методы Оптимизации”

Выполнили Раков Николай, Булкина Милена

Санкт-Петербург, 2021

1 Постановка задания

1. Реализовать прямой метод решения СЛАУ на основе LU-разложения с учетом следующих требований:
    - формат матрицы – профильный;
    - размерность матрицы, элементы матрицы и вектор правой части читать из файлов, результаты записывать в файл;
    - в программе резервировать объём памяти, необходимый для хранения в нем только одной матрицы и необходимого числа векторов (то есть треугольные матрицы, полученные в результате разложения, должны храниться на месте исходной матрицы);
    - элементы матрицы обрабатывать в порядке, соответствующем формату хранения, то есть необходимо работать именно со столбцами верхнего и строками нижнего треугольников.
2. Провести исследование реализованного метода на матрицах, число обусловленности которых регулируется за счёт изменения диагонального преобладания (то есть оценить влияние увеличения числа обусловленности на точность решения).
    - Оценить погрешность решения для каждого k, для которого система вычислительно разрешима.
    - Для одного из значений k попытаться найти операцию, вызывающую скачкообразное накопление погрешности, пояснить полученные результаты.
3. Провести аналогичные исследования на матрицах Гильберта различной размерности. Матрица Гильберта размерности k строится следующим образом:
$$a_{ij} = \frac{1}{i+j-1}, i,j = \overline{1,k}$$
4. Реализовать метод Гаусса с выбором ведущего элемента для плотных матриц. Сравнить метод Гаусса по точности получаемого решения и по количеству действий с реализованным прямым методом LU – разложения.
5. Реализовать метод сопряженных градиентов для решения СЛАУ, матрица которых хранится в разреженном строчно – столбцовом и является симметричной.

2 Формат хранения матриц

2.1 Плотный

Плотный формат хранения матриц используется, когда матрица не обладает определенной структурой и имеет малые размеры. Этот формат требует $\mathcal{O}(n^2)$ памяти.

2.2 Профильный

Профильный формат хранения матриц используется, когда ненулевые элементы матрицы расположены в произвольном порядке, но при этом они сосредоточены у главной диагонали. Этот формат занимает меньше памяти, чем плотный, если ненулевые элементы плотно расположены около главной диагонали.
Массивы, необходимые для хранения профильной квадратной матрицы:

- Массивы al и au - вещественные массивы, которые хранят внедиагональные элементы нижнего (по строкам) и верхнего (по столбцам) треугольника матрицы.
- Массив ia[n] хранит информацию о профиле. Он содержит указатели начала строк (столбцов) нижнего (верхнего) треугольника в массиве al (au). Индексный массив ia формируется следующим образом:
  - первые два элемента индексного массива ia всегда равны 1: $\mathrm{ia}[0] = \mathrm{ia}[1] = 0$, так как в первой строке в нижнем треугольнике нет внедиагональных элементов
  - к элементу ia[k] добавляется количество элементов в профиле k -ой строки и получается элемент $\mathrm{ia}[k + 1]$.
- di[n] - вещественный массив. Он хранит все диагональные элементы.

2.3 Разреженный строчно-столбцовый симметричный формат

В отличие от профильного формата дополнительно необходим еще один массив, содержащий информацию о положении внедиагонального элемента в строке (для нижнего треугольника) или в столбце (для верхнего

треугольника). Используется, когда количество нулевых элементов велико.
Необходимые массивы для данного формата:

- Вещественные массивы al и au, которые хранят внедиагональные элементы нижнего (по строкам) и верхнего (по столбцам) треугольника матрицы.

- Целочисленный массив ja хранит номера столбцов (строк) внедиагональных элементов нижнего (верхнего) треугольника матрицы.

- Целочисленный массив ia[n] хранит указатели начала строк (столбцов) в массивах ja , al и au.

- di[n] - вещественный массив. Он хранит все диагональные элементы.

3 Решение СЛАУ

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

3.1 Метод Гаусса с выбором главного элемента

Данный метод имеет преимущество перед обычным методом последовательного исключения Гаусса, так как в последнем среди ведущих элементов могут оказаться очень маленькие по абсолютной величине. Тогда при делении на данные элементы получается большая вычислительная погрешность.

В данном методе выбирается наибольший по модулю элемент.

3.2 LU - разложение

Разложение LU:

- $L_{ii} = A_{ii} - \sum\limits_{k=1}^{i-1} L_{ik}U_{ki}$

- $U_{ii} = 1$

- $L_{ij} = A_{ij} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} L_{ik} U_{kj}, j = 1 \dots i-1$
- $L_{ji} = \frac{1}{L_{jj}} \left(A_{ji} - \sum\limits_{k=1}^{j-1} L_{jk} U_{ki}, j = 1 \dots i-1) \right)$

Алгоритм решения СЛАУ:

1. Находим L и U из матрицы A
2. Прямым ходом Гаусса решаем Ly = b, находим y
3. Обратным ходом решаем Ux = y, находим x

3.3 Использование МСГ для решения СЛАУ

Можно использовать МСГ для решения СЛАУ с симметричной положительно определенной матрицей A. Нам нужно найти решение уравнение Ax - b = 0 - это градиент функции $f(x) = \frac{1}{2}(Ax, x) - (b, x)$, следовательно решение СЛАУ можно свести к минимизации f(x).

Алгоритм:

1. Подготовка перед итерационным процессом:
   - Выберем начальное приближение x^0
   - $r^0 = b - Ax^0$
   - $z^0 = r^0$
2. k-ая итерация метода:
   - $\alpha_k = \frac{(r^{k-1}, r^{k-1})}{(Az^{k-1}, z^{k-1})}$
   - $x^k = x^{k-1} + \alpha_k z^{k-1}$
   - $r^k = r^{k-1} - \alpha_k A z^{k-1}$
   - $\beta_k = \frac{(r^k, r^k)}{(r^{k-1}, r^{k-1})}$
   - $z^k = r^k + \beta_k z^{k-1}$

4 Результаты исследований

Таблица 1: Гаусс на основе LU-разложения на матрицах Гильберта

n	$\|x^* - x_k\|$	$\frac{\|x^* - x_k\|}{\|x^*\|}$
3	2.625108e-14	7.015897e-15
4	8.830921e-13	1.612298e-13
5	3.558406e-11	4.798154e-12
6	2.319962e-11	2.431981e-12
7	2.009583e-08	1.698407e-09
8	1.333407e-06	9.335716e-08
9	7.270362e-05	4.306591e-06
10	3.503464e-03	1.785531e-04
20	8.003411e+02	1.493943e+01
30	1.081093e+03	1.111814e+01
40	5.560919e+03	3.737299e+01
50	2.138525e+04	1.032189e+02
100	6.160375e+04	1.059069e+02
1000	3.386377e+08	1.853405e+04

Матрицы Гильберта являются стандартным примером плохо обусловленных матриц, число обусловленности возрастает как $O((1+\sqrt{2})^{4n}/\sqrt{n})$. Именно поэтому даже при небольших n невязка велика.

Таблица 2: Гаусс на основе LU-разложения на матрицах с диагональным преобладанием

n	k	$\|x^* - x_k\|$	$\frac{\|x^* - x_k\|}{\|x^*\|}$
10	0	1.306113e-13	6.656567e-15
10	1	1.113850e-12	5.676703e-14
10	2	1.357311e-11	6.917498e-13
10	3	8.940309e-11	4.556404e-12
10	4	1.227695e-09	6.256913e-11
10	5	1.644495e-08	8.381121e-10
10	6	8.972282e-08	4.572698e-09
10	7	1.401666e-06	7.143552e-08
10	8	2.194633e-05	1.118488e-06
10	9	8.997474e-05	4.585538e-06
10	10	1.640537e-03	8.360949e-05
100	0	6.364530e-10	1.094166e-12
100	1	4.825382e-09	8.295615e-12
100	2	3.058891e-08	5.258730e-11
100	3	2.108344e-07	3.624585e-10
100	4	2.877851e-06	4.947493e-09
100	5	5.980700e-06	1.028179e-08
100	6	1.293710e-04	2.224098e-07
100	7	1.217430e-03	2.092960e-06
100	8	2.897889e-02	4.981941e-05
100	9	2.569926e-01	4.418120e-04
100	10	2.680254e+00	4.607791e-03
1000	0	6.124098e-07	3.351793e-11
1000	1	8.628147e-06	4.722289e-10
1000	2	9.231194e-05	5.052344e-09
1000	3	1.615442e-03	8.841512e-08
1000	4	7.150361e-03	3.913479e-07
1000	5	2.549932e-01	1.395609e-05
1000	6	7.899812e-01	4.323662e-05
1000	7	1.701534e+01	9.312704e-04
1000	8	2.542212e+01	1.391383e-03
1000	9	1.187467e+03	6.499153e-02
1000	10	9.924544e+03	5.431823e-01

Таблица 3: Метод Гаусса с выбором ведущего элемента на матрицах с диагональным преобладанием

n	k	$\|x^* - x_k\|$	$\frac{\|x^* - x_k\|}{\|x^*\|}$
10	0	1.323308e-13	6.744200e-15
10	1	5.093242e-13	2.595757e-14
10	2	1.452915e-11	7.404738e-13
10	3	1.785659e-10	9.100563e-12
10	4	7.609669e-11	3.878247e-12
10	5	2.750950e-08	1.402014e-09
10	6	2.090429e-07	1.065381e-08
10	7	3.747852e-07	1.910082e-08
10	8	3.320164e-06	1.692112e-07
10	9	3.660984e-05	1.865810e-06
10	10	5.416534e-04	2.760521e-05
100	0	6.072080e-10	1.043889e-12
100	1	2.574989e-09	4.426825e-12
100	2	4.272554e-08	7.345215e-11
100	3	2.570235e-07	4.418652e-10
100	4	3.726496e-06	6.406451e-09
100	5	2.684952e-05	4.615868e-08
100	6	4.180415e-04	7.186813e-07
100	7	6.500045e-03	1.117463e-05
100	8	3.351292e-02	5.761415e-05
100	9	2.643501e-01	4.544608e-04
100	10	4.798962e-01	8.250196e-04
1000	0	1.346156e-06	7.367674e-11
1000	1	1.800755e-05	9.855748e-10
1000	2	1.018017e-04	5.571728e-09
1000	3	5.166266e-04	2.827560e-08
1000	4	1.454307e-02	7.959598e-07
1000	5	9.213756e-02	5.042800e-06
1000	6	1.780244e+00	9.743490e-05
1000	7	1.352157e+01	7.400518e-04
1000	8	6.053637e+01	3.313229e-03
1000	9	1.527310e+03	8.359154e-02
1000	10	6.863735e+03	3.756605e-01

Таблица 4: Метод Гаусса с выбором ведущего элемента на матрицах Гильберта

n	$\|x^* - x_k\|$	$\dfrac{\|x^* - x_k\|}{\|x^*\|}$
3	2.625108e-14	7.015897e-15
4	8.830921e-13	1.612298e-13
5	3.558406e-11	4.798154e-12
6	2.319962e-11	2.431981e-12
7	2.009583e-08	1.698407e-09
8	1.333407e-06	9.335716e-08
9	7.270362e-05	4.306591e-06
10	3.503464e-03	1.785531e-04
20	8.003411e+02	1.493943e+01
30	1.081093e+03	1.111814e+01
40	5.560919e+03	3.737299e+01
50	2.138525e+04	1.032189e+02
100	6.160375e+04	1.059069e+02
1000	3.386377e+08	1.853405e+04

Аналогично предыдущему методу, для матриц Гильберта приводит к очень большим ошибкам даже при небольшой размерности матриц.

Таблица 5: МСГ на плотных матрицах Гильберта

n	кол-во итераций	$\|x^* - x_k\|$	$\frac{\|x^* - x_k\|}{\|x^*\|}$	cond(A)
10	5	3.178324e-01	1.619824e-02	2.032544e+05
20	6	7.960770e-01	1.485984e-02	1.995758e+05
30	8	8.950385e-01	9.204728e-03	5.751244e+05
40	8	2.043063e+00	1.373071e-02	2.123930e+05
50	10	1.455476e+00	7.025059e-03	9.638469e+05
100	12	4.095343e+00	7.040560e-03	7.703249e+05
200	14	1.137471e+01	6.939539e-03	6.666093e+05
300	14	3.060519e+01	1.017629e-02	2.860521e+05
400	14	5.966772e+01	1.289427e-02	1.526146e+05
500	17	5.331629e+01	8.247355e-03	4.310517e+05
1000	18	1.440971e+02	7.886610e-03	1.205901e+05

Заметим, что в отличие от методов Гаусса, МСГ абсолютная и относительная погрешность существенно меньше, а абсолютная погрешность линейно зависит от размерности.

Таблица 6: МСГ на матрице с диагональным преобладанием

n	кол-во итераций	$\|x^* - x_k\|$	$\frac{\|x^* - x_k\|}{\|x^*\|}$	cond(A)
10	9	5.404132e-14	2.754201e-15	4.166323e+00
100	12	1.403758e-05	2.413287e-08	4.986249e-01
1000	10	1.999675e-04	1.094446e-08	5.053610e-01
10000	67	5.213623e-02	3.257148e-07	3.490549e+00
100000	72	2.073174e+00	1.135515e-07	1.752933e+00

Таблица 7: МСГ на матрице с обратным знаком внедиагональных элементов

n	кол-во итераций	$\|x^* - x_k\|$	$\frac{\|x^* - x_k\|}{\|x^*\|}$	cond(A)
10	9	1.601063e-12	8.159773e-14	6.672343e+01
100	12	7.113634e-06	1.222949e-08	5.021166e-01
1000	10	1.654867e-04	9.057290e-09	4.988307e-01
10000	54	1.958591e-01	9.124046-07	1.784023+00
100000	81	3.197423e+00	9.328380e-07	1.784023e+00

5 Выводы

Из таблиц можно было сделать вывод, что порядок погрешностей методов Гаусса совпадают.

Если сравнивать методы на матрицах Гильберта, можно заметить, что при использовании МСГ погрешности существенно меньше, а при использовании методов Гаусса мы видим экспоненциальный рост относительной погрешности.

Минус МСГ для решения СЛАУ - применимо только для симметричных матриц, но при этом, в случае хорошо обусловленных матриц за небольшое количество итераций, из чего следует, что на матрицах произвольно обусловленных, количество итераций получается порядка квадрата размерности.

При том, что порядок погрешностей методов Гаусса совпадает, прямой ход с выбором ведущего элемента работает за $\mathcal{O}(n^2) + \dfrac{n^3}{3}$, а с предварительно посчитанным LU-разложением — за $\mathcal{O}(n^2)$, получается, что второй алгоритм эффективнее для фиксированной матрицей.