Tema nr. 4

În fişierele m_rar_2017_i.txt, $\boldsymbol{i=1,\dots,4}$ postate pe pagina laboratorului, sunt memorate pentru 4 sisteme liniare cu matrice rară (cu *'puţine'* elemente $a_{ij} \neq 0$), $Ax = b$, următoarele elemente:

- n dimensiunea sistemului,
- b_i , $i=1,2, \dots , n$ elementele vectorului termenilor liberi $b \in \mathbb{R}^n$
- $a_{ij} \neq 0$, i, j - elementele nenule din matricea rară $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, indicii de linie şi de coloană ai respectivului element.

1. Folosind fişierele ataşate, să se citească dimensiunea sistemului, vectorul termenilor liberi şi să se genereze vectorii necesari pentru memorarea economică a matricii rare (se va folosi schema de memorare rară descrisă în Tema 3). Se presupune că elementele nenule ale matricii sunt plasate aleator în fişier (nu sunt ordonate după indicii de linie sau de coloană, sau altfel). Să se verifice că elementele de pe diagonală ale matricii sunt nenule.
   Se consideră dată precizia calculelor $\varepsilon = 10^{-p}$.

2. Cu aceaste memorări rare ale matricii A să se aproximeze soluţia sistemului liniar:

$$Ax=b \tag{1}$$

   folosind o metoda Gauss-Seidel. Să se afișeze și numărul de iterații efectuate.

3. Să se verifice soluţia calculată afişând norma:

$$\left\| A x_{GS} - b \right\|_\infty$$

unde $\boldsymbol{x_{GS}}$ este aproximarea soluţiei exacte obţinută cu algoritmul Gauss-Seidel.

4. În toate calculele care includ matricea $\boldsymbol{A}$, se cere să se utilizeze memorarea rară a matricii (să nu se aloce în program nici o matrice clasică).

5. La implementarea metodei Gauss-Seidel să se folosească un singur vector $\boldsymbol{x_{GS}}$.

Bonus 30pt: implementarea metodei gradienților bi-conjugați stabilizată, BiCGStab (15pt) + documentație (15pt).

Metode iterative de rezolvare a sistemelor liniare

Pp. că **det** $\boldsymbol{A \neq 0}$, vom nota soluţia exactă a sistemului (1) cu $\boldsymbol{x}^*$:

$$\boldsymbol{x^* := A^{-1}b.}$$

Metodele iterative de rezolvare a sistemelor liniare au fost deduse pentru sistemele de dimensiune '*mare*' ($\boldsymbol{n}$ '*mare*'), cu matricea sistemului $\boldsymbol{A}$, matrice rară (cu *'puţine'* elemente $\boldsymbol{a_{ij}}$ nenule). În cazul metodelor iterative matricea $\boldsymbol{A}$ nu se transformă (ca în cazul agoritmului de eliminare Gauss sau a descompunerilor $\boldsymbol{LU}$ sau a factorizărilor $\boldsymbol{QR}$) ci sunt folosite doar elementele nenule ale matricii pentru aproximarea soluţiei exacte $\boldsymbol{x}^*$. Pentru matricile rare se folosesc scheme de memorare economice specifice.

Pentru a aproxima soluţia $\boldsymbol{x}^*$ se construieşte un şir de vectori $\left\{\boldsymbol{x}^{(k)}\right\} \subset \mathbb{R}^n$ care, în anumite condiţii, converge la soluţia exactă $\boldsymbol{x}^*$ a sistemului (1):

$$\boldsymbol{x^{(k)} \to x^* \ , \ \textbf{pentru } k \to \infty}$$

Vectorul $x^{(0)}$ se iniţializează, de obicei, cu 0:

$$x_i^{(0)} = 0 \ , \ i = 1,\dots,n \qquad (2)$$

Atunci când converge, limita şirului este chiar x^* soluţia sistemului (1).

Metoda Gauss-Seidel

Vom presupune că toate elementele diagonale ale matricii A sunt nenule:

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

Când se citeşte matricea din fişier, se cere să se verifice dacă elementele diagonale ale matricii sunt nenule ($|a_{ii}| > \varepsilon, \ \forall i$). Dacă există un element diagonal nul, nu se poate rezolva sistemul liniar folosind metoda iterativă Gauss-Seidel.

Şirul de vectori generat de metoda Gauss-Seidel este următorul:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{\left(b_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} x_j^{(k)} \right)}{a_{ii}} \ , \quad i = 1,2,\dots,n. \qquad (3)$$

Formula de calcul de mai sus trebuie adaptată noului tip de memorare a matricii A. În sumele de mai sus sunt necesare doar elemntele a_{ij} nenule. Pentru un calcul rapid al componentei i a vectorului de aproximare $x_i^{(k+1)}$ avem nevoie să accesăm uşor elementele liniei i ale matricii A, din acest motiv în schema economică de memorare vom ţine cont de acest lucru.

Se ştie că dacă matricea $\boldsymbol{A}$ are diagonala dominantă în raport cu liniile (sau coloanele) matricii, adică:

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

şirul $\{x^{(k)}\}$ construit cu metoda Gauss-Seidel converge la soluţia x^*. Pentru metodele iterative de rezolvare a sistemelor liniare convergenţa sau divergenţa şirului $\{x^{(k)}\}$ nu depinde de alegerea iteraţiei iniţiale $x^{(0)}$.

Pentru a aproxima soluţia x^* trebuie să calculăm un termen al şirului $x^{(k)}$ pentru k suficient de mare. Se ştie că, dacă diferenţa dintre doi termeni consecutivi ai şirului $\{x^{(k)}\}$ devine suficient de *'mică'*, atunci ultimul vector calculat este *'aproape'* de soluţia căutată:

$$\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \| \le \varepsilon \Rightarrow \| x^{(k)} - x^* \| \le c\varepsilon ,\ c \in \mathbb{R}_+ \rightarrow\ x^{(k)} \approx x^* \quad (2)$$

Nu este nevoie să memorăm toţi vectorii calculaţi ai şirului $\{x^{(k)}\}$ ci avem nevoie doar de ultimul vector, cel care satisface prima inegalitate din relaţia (2) ($\| x^{(k)} - x^{(k-1)} \| \le \varepsilon$). În program s-ar putea utiliza doar doi vectori:

$$x^c \text{ pentru vectorul } x^{(k+1)} \text{ şi } x^p \text{ pentru vectorul } x^{(k)}.$$

În cazul metodei Gauss-Seidel se poate folosi un singur vector pe parcursul calculelor.

$$x_{GS} = x^c = x^p.$$

În cazul folosirii unui singur vector pentru aproximarea soluţiei, aplicarea formulei (3) şi calculul normei $\|x^{(k)}-x^{(k-1)}\|=\|x^c-x^p\|$ trebuie făcute în acelaşi timp (în aceeaşi buclă *for*).

Schemă de implementare a unei metode iterative

$x^c = x^p = 0;$

$k=0;$

do

{

$x^p = x^c;$

calculează noul x^c folosind x^p (cu formula (3));

calculează $\Delta x = \| x^c - x^p \|;$

$k=k+1;$

}

while ($\Delta x \geq \varepsilon$ **şi** $k \leq k_{max}$ **şi** $\Delta x \leq 10^8$) //($k_{max} = 10000$)

if ($\Delta x < \varepsilon$) $x^c \approx x^*$; // x^c este aproximarea căutată a soluţiei

else *‚divergenţă';*

Exemplu:

Matricea:

$$\boldsymbol{A}=\begin{pmatrix} \mathbf{102.5} & \mathbf{0.0} & \mathbf{2.5} & \mathbf{0.0} & \mathbf{0.0} \\ \mathbf{3.5} & \mathbf{104.88} & \mathbf{1.05} & \mathbf{0.0} & \mathbf{0.33} \\ \mathbf{0.0} & \mathbf{0.0} & \mathbf{100.0} & \mathbf{0.0} & \mathbf{0.0} \\ \mathbf{0.0} & \mathbf{1.3} & \mathbf{0.0} & \mathbf{101.3} & \mathbf{0.0} \\ \mathbf{0.73} & \mathbf{0.0} & \mathbf{0.0} & \mathbf{1.5} & \mathbf{102.23} \end{pmatrix}$$

Pp. că:

$$\boldsymbol{x}^{(0)}=\begin{pmatrix} \mathbf{1.0} \\ \mathbf{2.0} \\ \mathbf{3.0} \\ \mathbf{4.0} \\ \mathbf{5.0} \end{pmatrix} \quad , \quad \boldsymbol{b}=\begin{pmatrix} \mathbf{6.0} \\ \mathbf{7.0} \\ \mathbf{8.0} \\ \mathbf{9.0} \\ \mathbf{1.0} \end{pmatrix}$$

$x_1^{(1)}$ (varianta clasică)

$$= (b_1 - a_{12}x_2^{(0)} - a_{13}x_3^{(0)} - a_{14}x_4^{(0)} - a_{15}x_5^{(0)}) / a_{11} =$$

$$= (6.0 - 0.0 * 2.0 - 2.5 * 3.0 - 0.0 * 4.0 - 0.0 * 5.0) / 102.5$$

(varianta economică folosește elementele de pe linia 1 şi elementul d_1)

$$= (6.0 - 2.5 * 3.0) / 102.5 = -0.01463414...$$

$\boldsymbol{x_2^{(1)}}$ (varianta clasică)

$$= (\boldsymbol{b_2 - a_{21}x_1^{(1)} - a_{23}x_3^{(0)} - a_{24}x_4^{(0)} - a_{25}x_5^{(0)}) / a_{22}} =$$

$$= \mathbf{(7.0 - 3.5 * (-0.01463414...) - 1.05 * 3.0 - 0.0 * 4.0 - 0.33 * 5.0) / 104.88}$$

(varianta economică foloseşte elementele nenule de pe linia 2 si $\boldsymbol{d_2}$)

$$= \mathbf{(7.0 - 1.05 * 3.0 - 3.5 * (-0.01463414...) - 0.33 * 5.0) / 104.88}$$

$\boldsymbol{x_3^{(1)}}$ (varianta clasică)

$$= (\boldsymbol{b_3 - a_{31}x_1^{(1)} - a_{32}x_2^{(1)} - a_{34}x_4^{(0)} - a_{35}x_5^{(0)}) / a_{33}} =$$

$$= \mathbf{(8.0 - 0.0 * (-0.01463414...) - 0.0 *} \boldsymbol{x_2^{(1)}} \mathbf{- 0.0 * 4.0 - 0.0 * 5.0) / 100.0}$$

(varianta economică foloseşte elementele nenule de pe linia 3)

$$= \mathbf{(8.0) / 100.00}$$

$\boldsymbol{x^{(k+1)}[i]}$ **(**varianta economică foloseşte elementele nenule de pe linia $\boldsymbol{i}$ si $\boldsymbol{d_i}$)

$$= \frac{\left(\boldsymbol{b[i]} - \sum (\text{valoare} \neq \mathbf{0}\ \text{de pe linia}\ \boldsymbol{i}) * \boldsymbol{x}^{(?)}[\text{indice de coloană corespunzător valorii}]\right)}{\text{valoarea elementului diagonal de pe lina}\ \boldsymbol{i}\ (\boldsymbol{d_i})}$$

Sistemele memorate în fişierele postate pe pagina cursului au următoarele soluții:

- m_rar_2017_1.txt are soluţia $\boldsymbol{x_i = i / 3.0,\ \forall i = 1, n}$,
- m_rar_2017_2.txt: $\boldsymbol{x_i = 1.0 / 3.0,\ \forall i = 1, n}$
- m_rar_2017_3.txt $\boldsymbol{x_i = 1.0\ ,\ \forall i}$
- m_rar_2017_4.txt $\boldsymbol{x_i = i\ ,\ \forall i = 1, 2, ..., n}$. (?!?)