Metody Numeryczne
Projekt 2 – Układy równań liniowych

dr hab. inż. Grzegorz Fotyga, prof. PG

24 marca 2024

1. Wstęp

Celem projektu jest implementacja i analiza dwóch metod iteracyjnych (Jacobiego i Gaussa-Seidla) oraz jednej metody bezpośredniej (faktoryzacja LU) rozwiązywania układów równań liniowych. Testy poszczególnych metod będą przeprowadzane na układach równań, które mogą powstać w wyniku dyskretyzacji równań różniczkowych i są powszechnie stosowane w takich zagadnieniach jak: elektronika, elektrodynamika, mechanika (zastosowania lotnicze, biomechanika, motoryzacja), badanie wytrzymałości materiałów i konstrukcji, symulacje odkształceń, naprężeń, przemieszczeń i drgań, akustyka, fotonika, termodynamika, dynamika płynów i wiele innych.

W rzeczywistych problemach rozwiązywane są układy równań zawierające setki milionów niewiadomych, dla których obliczenia trwają często wiele godzin, a nawet dni, mimo wykorzystywania najnowszych superkomputerów. Opracowanie nowych efektywnych metod rozwiązań (dostosowanych do współczesnych architektur komputerowych) jest dużym wyzwaniem zarówno z punktu widzenia matematyki, jak i informatyki. Jest ono przedmiotem badań wielu ośrodków naukowych, ponieważ bez niego rozwój wymienionych wyżej dziedzin wiedzy byłby **niemożliwy**.

W praktyce najczęściej stosuje się tak zwany rzadki format przechowywania macierzy (który przechowuje tylko wartości niezerowe i ich położenie w macierzy), ponieważ zdecydowana większość elementów ma wartość 0. Jednak ze względu na prostotę, w ramach tego projektu domyślnie będzie wykorzystywany tzw. format pełny (przechowujący wszystkie wartości, również 0), który może być stosowany w problemach zawierających zazwyczaj nie więcej niż kilka tysięcy niewiadomych. Mimo, że testowane będą jedynie podstawowe metody rozwiązań, wykonanie projektu będzie dobrym fundamentem do poznania bardziej zaawansowanych metod iteracyjnych (np. metody gradientów sprzężonych, GMRES, QMR itp.).

2. Konstrukcja układu równań

Układ równań liniowych ma następującą postać:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \tag{1}$$

gdzie $\mathbf{A}$ jest macierzą systemową[1], $\mathbf{b}$ jest wektorem pobudzenia[2], natomiast $\mathbf{x}$ jest wektorem rozwiązań reprezentującym szukaną wielkość fizyczną[3].

- Na potrzeby projektu należy przyjąć, że $\mathbf{A}$ jest tzw. macierzą pasmową o rozmiarze $N \times N$ i zdefiniowaną w (2), gdzie N ma wartość $9cd$, c jest przedostatnią cyfrą numeru Twojego indeksu, natomiast d ostatnią (np. dla indeksu 102263 $N = 963$). Macierz $\mathbf{A}$ zawiera więc pięć diagonali - główna z elementami $a1$, dwie sąsiednie z elementami $a2$ i dwie skrajne diagonale z elementami $a3$.

[1] W zależności od problemu może ona reprezentować np. obwód elektroniczny, geometrię sali koncertowej, turbinę, karoserię samochodu itp.

[2] np. impuls elektroniczny, wektor siły, fala dźwiękowa itp.

[3] np. rozkład pola elektromagnetycznego, natężenie dźwięku itp.

$$
\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a1 & a2 & a3 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a2 & a1 & a2 & a3 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ a3 & a2 & a1 & a2 & a3 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a3 & a2 & a1 & a2 & a3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & a3 & a2 & a1 \end{bmatrix}, \tag{2}
$$

- Prawa strona równania to wektor $\mathbf{b}$ o długości N.
- W wyniku rozwiązania układu równań (1) otrzymujemy wektor $\mathbf{x}$.

3. Wektor residuum

Ważnym elementem algorytmów iteracyjnych (np. Jacobiego i Gaussa-Seidla) jest określenie w której iteracji algorytm powinien się zatrzymać. W tym celu najczęściej korzysta się z residuum [1], czyli wektora który dla k – tej iteracji przyjmuje postać:

$$
\mathbf{res}^{(k)} = \mathbf{A}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{b}. \tag{3}
$$

Badając normę euklidesową residuum ($norm(\mathbf{res}^{(k)})$), możemy w każdej iteracji algorytmu obliczyć jaki błąd wnosi wektor $\mathbf{x}^{(k)}$. Jeżeli algorytm zbiegnie się do dokładnego rozwiązania, to residuum stanowić będzie wektor zerowy. Ponieważ w praktyce osiągnięcie dokładnego rozwiązania metodami iteracyjnymi jest niespotykane, to jako kryterium stopu przyjmuje się osiągnięcie normy residuum mniejszej niż np. 10^{-6}.

Residuum nazywane jest również wektorem reszt [2] lub wektorem residualnym [3]. W literaturze anglojęzycznej residuum określane jest jako *residual vector* lub *residual* [4].

4. Zadania

Sprawozdanie powinno zawierać m.in. analizę rezultatów osiągniętych w zadaniach **B**, **C**, **D**, **E**.

- **Zadanie A** – Stwórz układ równań dla $a1 = 5 + e$, gdzie e jest czwartą cyfrą Twojego indeksu, $a2 = a3 = -1$. Rozmiar macierzy N zdefiniowano w punkcie 2 tej instrukcji. $\mathbf{b}$ jest wektorem o długości N, którego $n-$ty element ma wartość $sin(n \cdot (f + 1))$, gdzie f jest trzecią cyfrą Twojego indeksu. We wstępie sprawozdania opisz rozwiązywane równanie macierzowe. (5%)

- **Zadanie B** – Zaimplementuj metody iteracyjne rozwiązywania układów równań liniowych: Jacobiego i Gaussa–Seidla. Opisz ile iteracji potrzebuje każda z nich w celu wyznaczenia rozwiązania układu równań z zadania **A**, którego norma residuum jest mniejsza niż 10^{-9}. Dla obu metod przedstaw na **wykresie** jak zmienia się norma residuum w kolejnych iteracjach wykonywanych w celu wyznaczenia rozwiązania (oś y w skali logarytmicznej). Porównaj czas trwania algorytmów. (30%)

- **Zadanie C** – Stwórz układ równań dla $a1 = 3$, $a2 = a3 = -1$, natomiast N i wektor $\mathbf{b}$ określ zgodnie z treścią zadania **A**. Czy metody iteracyjne dla takich wartości elementów macierzy **A** zbiegają się? Dla obu metod przedstaw na **wykresie** jak zmienia się norma residuum w kolejnych iteracjach (oś y w skali logarytmicznej). (10%)

- **Zadanie D** – Zaimplementuj metodę bezpośredniego rozwiązania układów równań liniowych: metodę faktoryzacji LU i zastosuj do równania badanego w p. **C**. Ile wynosi norma residuum w tym przypadku? (30%)

- **Zadanie E** – Stwórz **wykres** zależności czasu wyznaczenia rozwiązania dla trzech badanych metod w zależności od liczby niewiadomych $N = \{100, 500, 1000, 2000, 3000 \dots\}$ dla macierzy opisanej w zadaniu **A**. (10%)

- **Zadanie F** – Zwięźle opisz swoje obserwacje po wykonaniu zadań **A**–**E**. (15%)

Literatura

[1] Bjorck A., Dahlquist G., *Metody numeryczne*, PWN, 1987

[2] Fortuna Z., Macukow B., Wąsowski J., *Metody numeryczne*, PWN, 2017

[3] Kincaid, Cheney, *Analiza numeryczna*, WNT, 2006

[4] Saad, Yousef, *Iterative Methods for Sparse Linear Systems*, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2003.