

Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej

Kierunek: Informatyka Stosowana

Rok: 2020/21

Semestr: letni

Typ: stacjonarne

Nr albumu: 401984

Data: 15.03.2021



Sprawozdanie - Laboratorium nr 3
Rozwiązywanie algebraicznych układów równań liniowych metodami
iteracyjnymi

Spis treści

1	Wstęp teoretyczny	2
1.1	Macierz wstępowa	2
1.2	Norma euklidesowa	2
1.3	Metoda największego spadku	3
1.4	Metoda sprzężonego gradientu	4
2	Zadanie do wykonania	5
3	Wyniki	6
4	Podsumowanie	9

opracował:

Tomasz Szkaradek

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Macierz wstęgowa

Macierz wstęgowa lub pasmowa – kwadratowa macierz rzadka, której wszystkie elementy są zerowe poza diagonalą i wstęgą wokół niej.

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 & \dots & \dots & 0 \\ A_{21} & A_{22} & A_{22} & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & A_{32} & A_{33} & A_{34} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & A_{43} & A_{44} & A_{45} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & A_{54} & A_{55} & A_{56} \\ 0 & \dots & \dots & 0 & A_{65} & A_{66} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Mając dana macierz $n \times n$, jej elementy $a_{i,j}$ są niezerowe, gdy

$$i - k_1 \leq j \leq i + k_2, \quad \text{gdzie} \quad k_{1,2} \geq 0$$

określają tzw. szerokość wstęgi. Macierz wstęgowa można zapisać na $n \cdot (k_1 + k_2 + 1)$ zamiast na n^2 komórkach pamięci.

1.2 Norma euklidesowa

W przestrzeni wektorowej \mathbb{R}^N na \mathbb{R} możemy sprawdzić normę euklidesową

$$\|x\|_2 = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_2^2 + \dots + x_n^2} \quad (2)$$

definiujemy ją w skrócie jako pierwiastek z sumy kwadratów poszczególnych współrzędnych. Normę euklidesową możemy też zapisać jako

$$\|x\|_2 = \sqrt{r_k^T \cdot r_k} \quad (3)$$

1.3 Metoda największego spadku

Metoda ta jest gradientowym algorytmem, w której wielkość kroku jest dobierana tak, aby otrzymać największą wartość spadku wartości funkcji, w każdym kolejnym punkcie.

$$\alpha_k = \arg \min f(x^{(k)} - \alpha \nabla f(x^{(k)})) \quad (4)$$

W metodzie tej przybliżone rozwiązanie w $i + 1$ iteracji ma postać:

$$x_{i+1} = x_i + \alpha v_i$$

Jako v_i wybieramy kierunek gradientu Q gdzie:

$$\nabla Q = Ax_i - b = -r_i \Rightarrow v_i = -r_i$$

Następnie aby obliczyć α_i musimy obliczyć $Q(x_{i+1})$

$$Q(x_{i+1}) = Q(x_i - \alpha_i r_i) = -\frac{1}{2} x_i^T r - \frac{1}{2} x_i^T b + \frac{1}{2} \alpha_i^2 r_i^T A r_i + \alpha_i r_i^T r_i$$

i różniczkujemy je po parametrze wariacyjnym w celu znalezienia minimum

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha_i} = r_i^T r_i + \alpha_i r_i^T A r_i$$

jednak $\frac{\partial Q}{\partial \alpha_i} = 0$

$$\alpha_i = \frac{r_i^T r_i}{r_i^T A r_i}$$

Implementacja metody największego spadku na pseudokod wygląda następująco

```
inicjalizacja :      b, x
do{
    rk = b - Axk
    αk =  $\frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{r}_k^T A \mathbf{r}_k}$ 
    xk+1 = xk + αk rk
}while(||rk||2 > 10-6)
```

Rysunek 1: Pseudokod Metody największego spadku

gdzie:

- k - liczba iteracji
- x aktualnie najbliższe przybliżenie prawidłowego rozwiązania

- \mathbf{b} wektor wyrazów obcych
- \mathbf{A} macierz 1000x1000
- \mathbf{r} wektor reszt z każdą iteracją zbliża się do 0

Algorytm kończy swoje działanie kiedy norma wektora \mathbf{r} jest dostatecznie mała w tym przypadku 10^{-6}

1.4 Metoda sprzężonego gradientu

Metoda sprzężonego gradientu jest algorytmem numerycznym służącym do rozwiązywania niektórych układów równań liniowych. Pozwala rozwiązać te, których macierz jest symetryczna i dodatnio określona. Metoda gradientu sprzężonego jest metodą iteracyjną, więc może być zastosowana do układów o rzadkich macierzach, które mogą być zbyt duże dla algorytmów bezpośrednich takich jak np. rozkład LU. Metoda polega na wielokrotnego wykonywania sekwencji działań, które wyniku będą przybliżać oszacowanie dokładnego rozwiązania.

```
//inicjalizacja
     $\mathbf{v}_1 = \mathbf{r}_1 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_1$ 
    - - - - -
//petla iteracyjna CG
while( $\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k > 10^{-6}$ ){
     $\alpha_k = \frac{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}{\mathbf{v}_k^T \mathbf{A} \mathbf{v}_k}$ 
     $\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha_k \mathbf{v}_k$ 
     $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{r}_k - \alpha_k \mathbf{A} \mathbf{v}_k$ 
     $\beta_k = \frac{\mathbf{r}_{k+1}^T \mathbf{r}_{k+1}}{\mathbf{r}_k^T \mathbf{r}_k}$ 
     $\mathbf{v}_{k+1} = \mathbf{r}_{k+1} + \beta_k \mathbf{v}_k$ 
}
```

Rysunek 2: Pseudokod Metody sprzężonego gradientu

Z każdym obiegiem wektor \mathbf{x} będzie coraz dokładniejszym przybliżeniem rozwiązania. Operacja będzie powtarzana dopóki nie zostanie uzyskana zbieżność

2 Zadanie do wykonania

Podczas naszych 3 laboratoriów naszym zadaniem było rozwiązanie układu równań liniowych $A \cdot x = b$ korzystając z metody największego spadku oraz metoda sprzężonego gradientu a następnie porównać te dwie metody ze sobą. Na początku musieliśmy stworzyć macierz A o wymiarze $n=1000$ oraz zainicjalizować elementy na "wstędze" zgodnie z poniższym wzorem:

$$A[i][j] = \begin{cases} \frac{1}{1 + |i - j|} & \text{gdy } |i - j| < m \\ 0 & \text{gdy } |i - j| \geq m \end{cases}$$

gdzie $m=5$ oraz $i, j = 0, \dots, n - 1$ Następnie inicjalizujemy wektor wyrazów wolnych b według poniższego wzoru

$$b[i] = i + 1 \quad \text{gdzie } i = 0, \dots, n - 1 \quad (5)$$

wektor startowy x inicalizujemy na 2 sposoby samymi 0 albo samymi 1 Następnie dla metody największego spadku oraz metody sprzężonego gradientu sprawdzamy ilości iteracji. Dla poszczególnych iteracji zapisujemy aktualny numer iteracji, normę wektora $r_k - \|r_k\|$, wartość alfa oraz wartość normy euklidesowej wektora rozwiązań $x_k - \|x_k\|$ na koniec zapisujemy całkowity czas działania algorytmu. Wykonujemy następujące algorytmy dla podanych parametrów

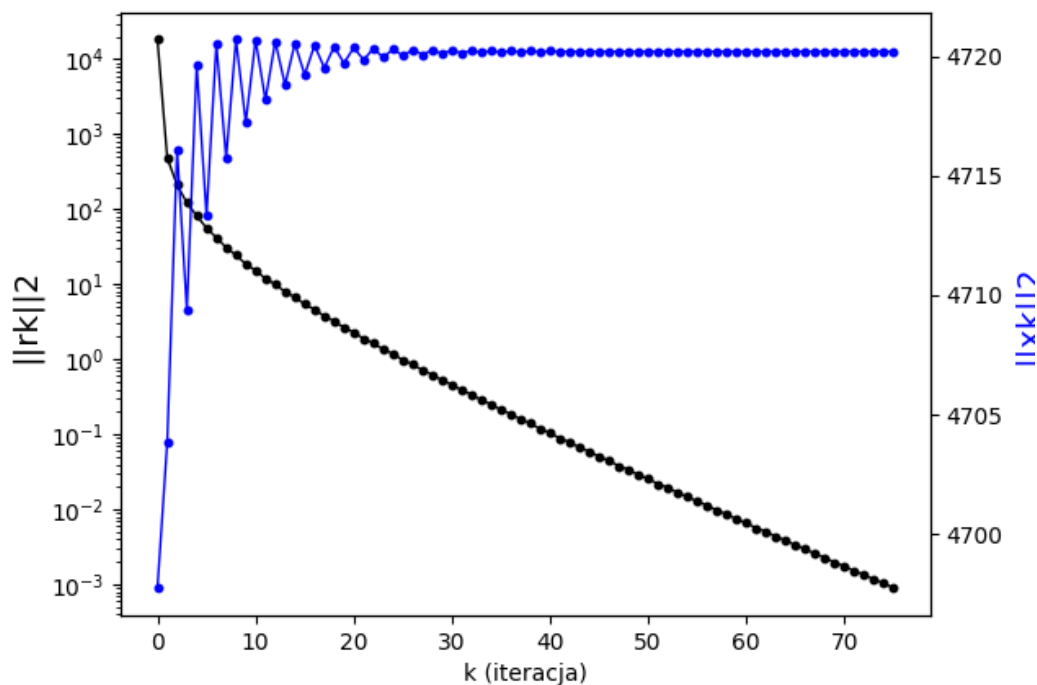
- metoda największego spadku $x=0$ $\text{eps}=10^{-3}$
- metoda największego spadku $x=0$ $\text{eps}=10^{-6}$
- metoda największego spadku $x=1$ $\text{eps}=10^{-6}$
- metoda sprzężonego gradientu $x=0$ $\text{eps}=10^{-6}$

Na koniec wygenerowaliśmy w Pythonie odpowiednie wykresy podsumowujące nasze wyniki.

3 Wyniki

Wszystkie metody zostały zaimplementowane w Pythonie prowadząc obliczenia na liczbach zmiennoprzecinkowych. Kończącym warunkiem zakończenia programu było uzyskanie przez wektor r_k normy euklidesowej mniejszej od ϵ . Wykresy zostały narysowane również w Pythonie za pomocą biblioteki matplotlib

(a) Metoda największego spadku

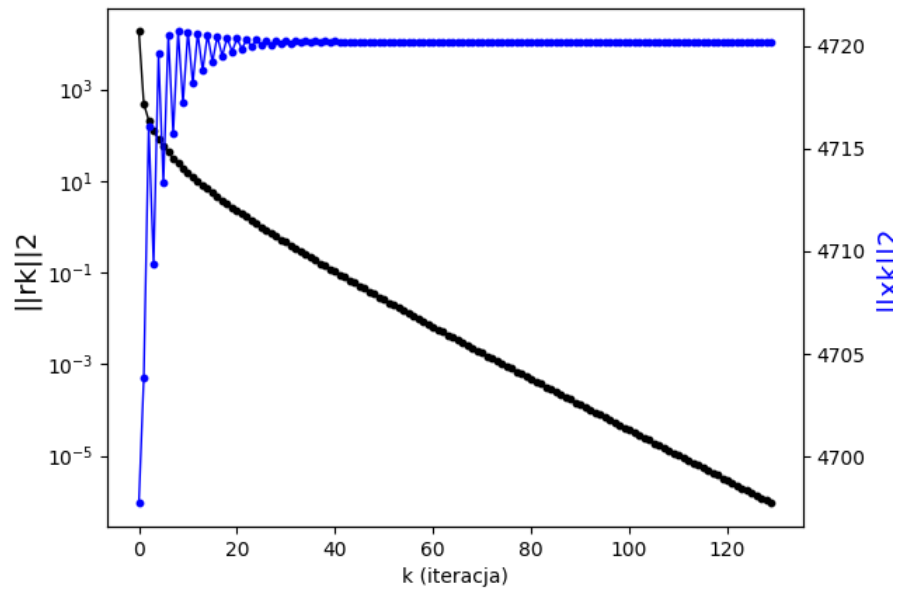


Rysunek 3: $x = 0$, $\epsilon = 10^{-3}$

Czas działania programu: 15.26 sekund

Liczba iteracji k: 76

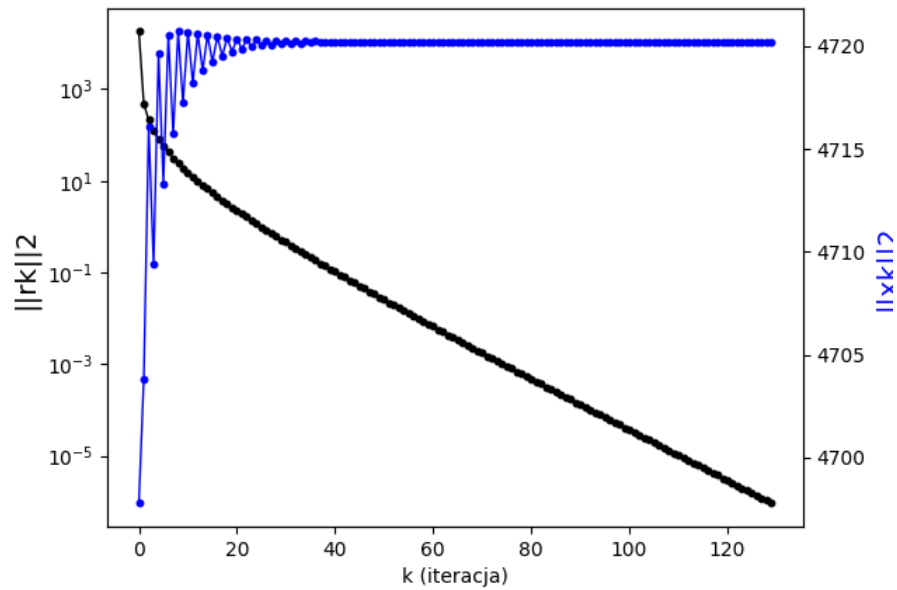
(b) Metoda największego spadku

Rysunek 4: $x = 0$, $\text{eps} = 10^{-6}$

Czas działania programu: 25.91 sekund

Liczba iteracji k : 130

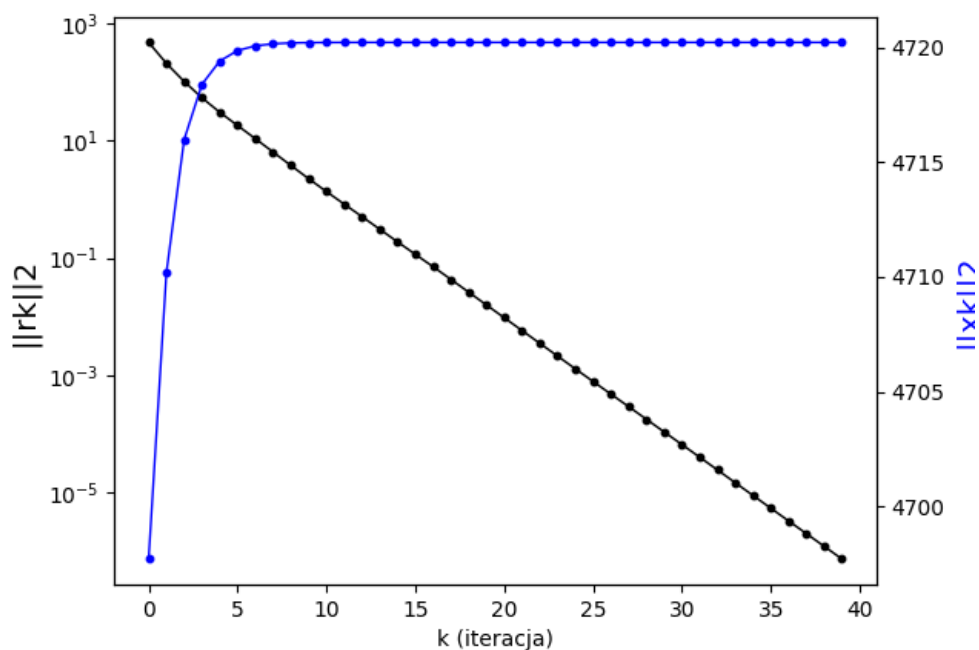
(c) Metoda największego spadku

Rysunek 5: $x = 1$, $\text{eps} = 10^{-6}$

Czas działania programu: 26.16 sekund

Liczba iteracji k : 130

(d) Metoda sprzężonego gradientu

Rysunek 6: $x = 0$, $\text{eps} = 10^{-6}$

Czas działania programu: 8.21 sekund

Liczba iteracji k: 40

(e) Metoda bezpośrednia Gaussa-Jordana

Czas działania programu: 116.76 sekund

Jak widać z wykresów w podpunktach a) b) c) i d) norma euklidesowa wektor $\|r_k\|$ zbiega do naszego ustalonego eps natomiast $\|x_k\|$ zbiega asymptotycznie do wyniku końcowego. Możemy też zauważyć że czas dla wektora $x=0$ oraz $x=1$ są różne ponieważ ustaliliśmy inne warunki początkowe i jak widać wektorowi $x=0$ jest bliżej do rozwiązania końcowego. Następnie przechodzimy do najciekawszego czyli czasu wykonania obliczeń przy pomocy biblioteki `time` zmierzaliśmy czas dla każdej z metod. Widać wyraźnie że metoda sprzężonego gradientu jest lepsza niż metoda największego spadku natomiast obie są znacząco efektywniejsze dla naszej macierzy niż metoda bezpośrednia Gaussa.

4 Podsumowanie

Otrzymane wyniki prowadzi nas do jednoznacznego stwierdzenia że metody iteracyjne są znacznie bardziej optymalne dla danej w tym zadaniu macierzy od metod bezpośrednich oraz że metoda sprzężonego gradientu jest szybsza (potrzebuje mniej iteracji) niż metoda największego spadku

Wyniki które nanieśliśmy na wykresy powyżej wyraźniej wskazują na wyższość metod iteracyjnych pod względem czasu wykonywania obliczeń. Stosując metody iteracyjne wykorzystujemy mniejszy zakres pamięci potrzebny do zapisania oraz przeprowadzenia obliczeń przez co są znacznie szybsze jednak ma to swoje wady metody iteracyjne można stosować w dość rzadkich i specyficznych przypadkach a mianowicie kiedy macierz A jest macierzą rzadką, dodatnio określoną oraz symetryczną w innym przypadku jesteśmy zmuszeni użyć metod bezpośrednich. Kolejna dość poważną wada jest to iż metody iteracyjne z teorii nie dają nam 100% poprawnego wyniku tylko pewne przybliżenie poprawnego rozwiązania