Sprawozdanie - laboratorium nr 3
Metoda sprzężonych gradientów dla macierzy wstęgowej

Damian Płóciennik

13 marca 2019

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Metoda sprzężonych gradientów

Metoda sprzężonych gradientów jest algorytmem numerycznym służącym do rozwiązywania niektórych układów równań liniowych, których macierz jest symetryczna i dodatnio określona. Jest ona metodą iteracyjną, więc może być zastosowana do układów o rzadkich macierzach, czyli takich gdzie większość elementów wynosi zero.

1.2 Macierz wstęgowa

Macierz wstęgową jest to kwadratowa macierz rzadka, której wszystkie elementy są zerowe poza diagonalą i wstęgą wokół niej. W takiej macierzy wstęgą nazywamy elementy:

$$a_{i,j} \neq 0, \quad \text{dla} \quad i - k_1 \leqslant j \leqslant i + k_2, \tag{1}$$

gdzie $k_1, \ k_2$ określają szerokość wstęgi.

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Zadanie polegało na rozwiązaniu układu równań liniowych $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ metodą sprzężonych gradientów.

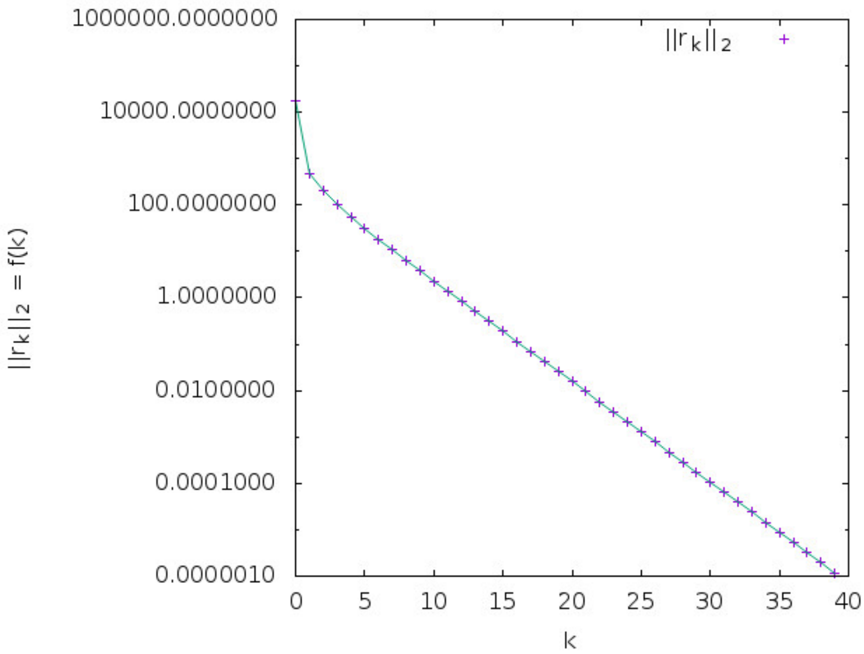
W celu wykonania zadania należało:

1. Utworzyć macierz układu o wymiarze $n = 1000$ i wypełnić jej elementy zgodnie z poniższą formułą:
$$\begin{array}{lll} a_{i,j} = \frac{1}{1+|i-j|}, & \text{gdy} \ \ |i-j| \leqslant m, & \text{dla } i,j = 0,\ldots,n-1, \\ a_{i,j} = 0, & \text{gdy} \ \ |i-j| > m. & \end{array} \tag{2}$$
Przyjąć $m = 5$.
2. Utworzyć wektor wyrazów wolnych $\vec{b}$. Jego elementy wypełnić następująco:
$$b_i = i + 1, \quad \text{dla} \quad i = 0,\ldots,n-1. \tag{3}$$
3. Utworzyć wektor startowy $\vec{x}$. Jego elementy wypełnić następująco:
$$x_i = 0, \qquad \text{dla} \quad i = 0,\ldots,n-1. \tag{4}$$
4. Zaprogramować metodę sprzężonego gradientu do rozwiązania układu równań liniowych.
5. Rozwiązać zdefiniowany powyżej układ równań przy użyciu metody sprzężonych gradientów. Jako warunek zakończenia przyjąć $\sqrt{r_k^T r_k} < 10^{-6}$.
6. Sporządzić wykresy $\|r_k\|_2 = f(k)$ oraz $\|x_k\|_2 = f(k)$, gdzie k - numer iteracji.

Następnie należało rozwiązać powyższy układ $\mathbf{A}\vec{x} = \vec{b}$ metodą eliminacji zupełnej, przeanalizować rozwiązanie oraz porównać wydajności obu metod.

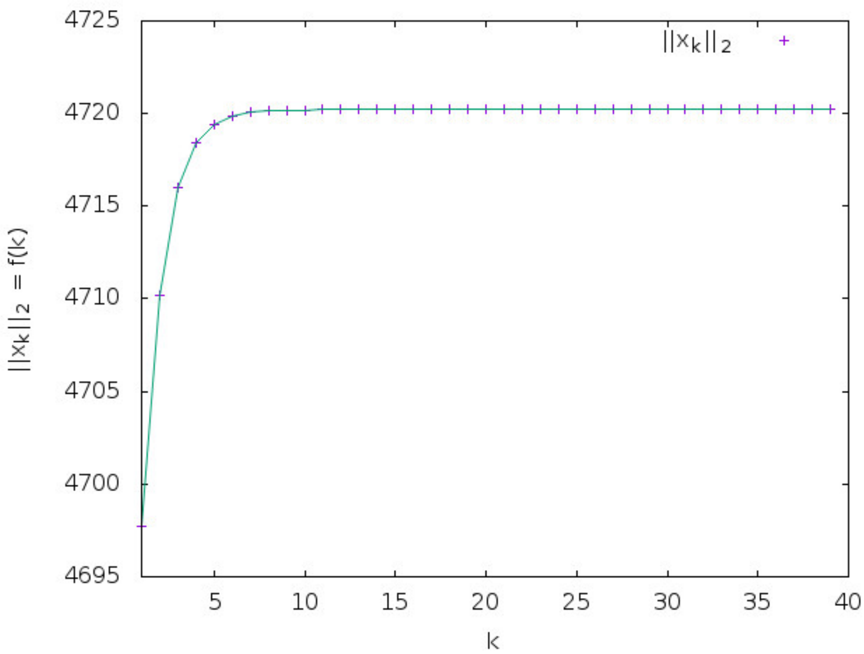
2.2 Wyniki

2.2.1 Wykresy otrzymanych rezultatów



Rysunek 1: Wykres zależności wartości normy euklidesowej wektora reszt od numeru iteracji

Na powyższym wykresie można łatwo dostrzec wykładniczy spadek błędu wraz ze wzrostem ilości iteracji.



Rysunek 2: Wykres zależności wartości normy euklidesowej wektora rozwiązań od numeru iteracji

Na powyższym wykresie można łatwo dostrzec, że norma euklidesowa wektora rozwiązań natomiast bardzo szybko osiągneła wartość, do której asymptotycznie zmierza cały wykres.

2.2.2 Analiza wydajności metody gradientów sprzężonych i metody eliminacji zupełnej

Do pomiaru czasu wykonania fragmentów kodu wykorzystano moduł chrono z biblioteki standardowej języka C++. Funkcje przeznaczone do tego celu z biblioteki języka C nie pozwalały otrzymać tak dokładnych wyników.

W poniższej tabeli zestawiono czasy rozwiązania układu równań liniowych metodą gradientów sprzężonych oraz metodą eliminacji zupełnej dla macierzy o różnych wielkościach. W przypadku macierzy $N = 10^4$ trwające pełną godzinę zegarową obliczenia nie pozwoliły na otrzymanie rozwiązania metodą Gaussa-Jordana, zatem odstąpiono od dalszych pomiarów dla tych warunków. Każdy z pomiarów powtórzono trzykrotnie, w celu wyeliminowania ewentualnych błędów związanych z na przykład chwilowym obciążeniem procesora.

$N = 10^3$		$N = 10^4$	
Met. grad. sprzęż.	Met. eliminacji	Met. grad. sprzęż.	Met. eliminacji
6.07652 ms	21874.4 ms	67.8823 ms	?
7.78076 ms	20979.8 ms	67.8116 ms	?
6.06970 ms	21401.4 ms	65.2899 ms	?

Tabela 1: Porównanie czasów obliczeń dla metody gradientów sprzężonych i metody eliminacji zupełnej

Łatwo zauważyć, że czas wykonania obliczeń dla metody eliminacji zupełnej dla coraz większych rozmiarów macierzy wejściowej znacznie odbiega od czasu obliczeń dla metody gradientów sprzężonych. Widać to także analizując złożoność obliczeniową obu metod, która wynosi odpowiednio $O(n^3)$ dla metody eliminacji zupełnej oraz $O(\sqrt{\kappa}m)$ [1] dla metody gradientów sprzężonych, gdzie κ jest wskaźnikiem uwarunkowania macierzy, a m ilością niezerowych elementów.

W celu zoptymalizowania programu w metodzie gradientów sprzężonych nie trzeba pamiętać wszystkich zer poza diagonalą macierzy i wstęgą wokół niej. Wskutek tego można ją zapisać na $N \cdot (k_1 + k_2 + 1)$ komórkach pamięci, gdzie k_1, k_2 określają szerokość wstęgi. W przypadku metody eliminacji zupełnej potrzebujemy natomiast aż n^2 komórek na zapis tej samej macierzy współczynników.

3 Wnioski

Metody iteracyjne, takie jak metoda gradientów sprzężonych, bardzo dobrze sprawdzają się do problemów zdefiniowanych przez macierze rzadkie wysokich wymiarów, które mogą być zbyt duże dla algorytmów bezpośrednich.

Zarówno złożoność obliczeniowa jak i zajętość pamięci metody gradientów sprzężonych jest wyraźnie niższa niż w metodzie eliminacji zupełnej.

Należy pamiętać, że przy użyciu metody gradientów sprzężonych nie jest możliwe rozwiązanie każdego problemu, ponieważ wymaga ona od macierzy symetryczności oraz dodatniej określoności.

Reasumując, metody iteracyjne są dobrym sposobem do rozwiązywania problemów zdefiniowanych przez macierze rzadkie wysokich wymiarów, co pozwala na znaczną oszczędność czasu wykonywania obliczeń oraz zajętości pamięci.

[1] Jonathan Richard Shewchuk, *An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain*, s. 37, `http://www.cs.cmu.edu/~quake-papers/painless-conjugate-gradient.pdf`, 20.03.2019.