Grzegorz Fotyga
Piotr Sypek

23 marca 2023

Metody numeryczne, laboratorium 3.

1. Wstęp

Celem tego laboratorium jest poznanie podstawowych cech bezpośrednich oraz iteracyjnych metod rozwiązywania układów równań liniowych. Do analizy metod iteracyjnych zostały wybrane dwa algorytmy: metoda Jacobiego oraz metoda Gaussa-Seidla.

Badanie metod rozwiązywania równania macierzowego zostanie przeprowadzone z zastosowaniem macierzy $\boldsymbol{M}$ zdefiniowanej w algorytmie PageRank, który został dokładniej opisany w instrukcji do laboratorium 2 (**Laboratorium_2.pdf**). W ramach tego laboratorium rozwiązywane będzie równanie macierzowe (1).

$$\boldsymbol{M}\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

W wyniku rozwiązania (1) otrzymujemy wektor $\boldsymbol{r}$, który zawiera wartości PageRank (PR) wszystkich N stron w sieci. Im wyższa wartość PR tym strona jest bardziej istotna w rozpatrywanej sieci.

1.1. Metody bezpośrednie

Bezpośrednia metoda rozwiązywania równania macierzowego to metoda, która pozwala wyznaczyć rozwiązanie równania macierzowego w skończonej liczbie operacji algebraicznych. W metodach bezpośrednich liczba wymaganych operacji algebraicznych silnie wzrasta wraz ze wzrostem rozmiaru macierzy, jednak umożliwiają one wyznaczenie rozwiązania z dużą dokładnością. W metodach bezpośrednich macierz zawarta w równaniu często przekształcana jest do zestawu macierzy pomocniczych, które ułatwiają wyznaczenie rozwiązania. Do metod bezpośrednich należą: rozkład LU ($\boldsymbol{M} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$), rozkład QR ($\boldsymbol{M} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{R}$), rozkład SVD ($\boldsymbol{M} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^T$). Bezpośrednie wyznaczenie rozwiązania równania macierzowego jest w tych metodach ułatwione ze względu na cechy macierzy pomocniczych, np. macierze $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{U}$ z rozkładu LU są macierzami trójkątnymi, więc rozwiązanie $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{b}$ można wyznaczyć stosując algorytm podstawienia w przód (ang. forward substitution), natomiast rozwiązanie $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{x}$ można wyznaczyć stosując algorytm podstawienia wstecz (ang. back substitution).

W metodach numerycznych jedną z powszechnie stosowanych zasad jest:

<u>nigdy nie odwracaj macierzy</u>

w celu wyznaczenia rozwiązania równania macierzowego $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{b}$. Jest to spowodowane głównie tym, że wyznaczenie macierzy odwrotnej jest bardzo kosztowne numerycznie i często prowadzi do wyznaczenia rozwiązania na bardzo niskim poziomie dokładności. W celu wyznaczenia rozwiązania równania macierzowego należy wybrać odpowiednią metodę bezpośredniego lub iteracyjnego rozwiązywania równań macierzowych.

W Matlabie wyznaczenie rozwiązania równania macierzowego można obliczyć przez wywołanie `r = M\b`. W Matlabie operator \ wywołuje procedurę, która określa najbardziej odpowiedni algorytm do wyznaczenia rozwiązania. Na temat możliwych wariantów obliczeń można przeczytać w dokumentacji funkcji `mldivide`, która jest tożsama z operatorem \. Dla badanych macierzy $\boldsymbol{M}$ można przyjąć, że omawiane wywołanie uruchomi algorytm rozkładu LU.

1.2. Metody iteracyjne

W tym podpunkcie przedstawiono sposób wyznaczenia dwóch algorytmów iteracyjnego rozwiązywania układów równań liniowych. Omawiane algorytmy to metoda Jacobiego i metoda Gaussa–Seidla.

Rozpatrzmy układ równań zapisany w postaci równania macierzowego (1). Macierz $\boldsymbol{M}$ z tego równania można przedstawić jako sumę macierzy trójkątnej dolnej $\boldsymbol{L}$, trójkątnej górnej $\boldsymbol{U}$ i diagonalnej $\boldsymbol{D}$, co zapisano w (2).

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{U} + \boldsymbol{D} \tag{2}$$

Poglądowe rozbicie macierzy $\boldsymbol{M}$ na macierze $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{U}$ oraz $\boldsymbol{D}$ przedstawiono na rys. 1. Po podstawieniu (2) do (1) oraz przeniesieniu elementów równania na prawą stronę otrzymujemy (3).

$$\boldsymbol{D}\boldsymbol{r} = -\left(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}\right)\boldsymbol{r} + \boldsymbol{b} \tag{3}$$

Mnożąc obustronnie (3) przez $\boldsymbol{D}^{-1}$ otrzymujemy (4).

$$\boldsymbol{r} = -\boldsymbol{D}^{-1}\left(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}\right)\boldsymbol{r} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{4}$$

Na podstawie (4) można wyznaczyć wektor rozwiązań w $(k+1)$-pierwszej iteracji metodą Jacobiego zdefiniowany w (5), przy czym zakładamy, że **wektor początkowy** $\boldsymbol{r}^0$ ma długość N i wszystkie elementy równe jeden.

$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = -\boldsymbol{D}^{-1}\left(\boldsymbol{L} + \boldsymbol{U}\right)\boldsymbol{r}^{(k)} + \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{b} \tag{5}$$

Analogicznie, można wyprowadzić wzór na schemat iteracyjny metody Gaussa-Seidla. Po podstawieniu (2) do (1) oraz przeniesieniu elementów równania na prawą stronę otrzymujemy (6).

$$\left(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L}\right)\boldsymbol{r} = -\boldsymbol{U}\boldsymbol{r} + \boldsymbol{b} \tag{6}$$

Po przeniesieniu na prawą stronę (6) czynnika $(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})$ otrzymujemy zależność na $(k+1)$-pierwszą iterację metody Gaussa-Seidla przedstawioną w (7).

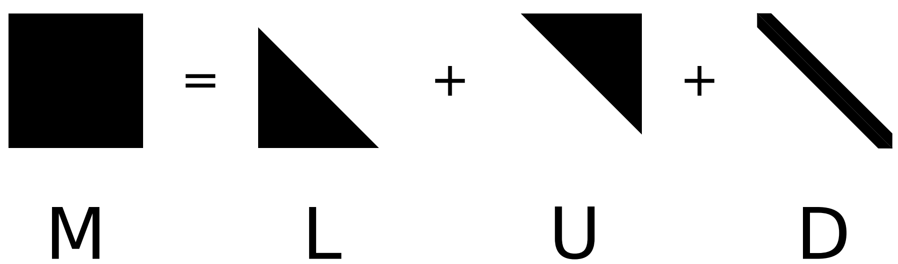
$$\boldsymbol{r}^{(k+1)} = -\left(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{r}^{(k)}\right) + \left(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L}\right)^{-1}\boldsymbol{b} \tag{7}$$

<u>UWAGA</u> – dużym błędem jest wyznaczenie macierzy odwrotnej do macierzy $(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L})$, ponieważ operacja ta jest kosztowna numerycznie, może powodować znaczne błędy numeryczne oraz może wywołać znaczny wzrost zapotrzebowania na pamięć RAM. Zamiast odwracania macierzy należy stosować podstawienie w przód (ang. forward substitution), co w Matlabie można otrzymać za pomocą operatora \, gdy macierz po lewej stronie operatora jest macierzą trójkątną dolną.

Ważnym elementem algorytmów iteracyjnych jest warunek zakończenia obliczeń. Zwykle zawiera on sprawdzenie czy norma wektora rezydualnego jest mniejsza od założonego progu dokładności obliczeń (np. 10^{-5}). Błąd rezydualny $\boldsymbol{res}$ w k-tej iteracji zdefiniowany jest w (8).

$$\boldsymbol{res}^{(k)} = \boldsymbol{M}\boldsymbol{r}^{(k)} - \boldsymbol{b} \tag{8}$$

Norma błędu rezydualnego umożliwia oszacowanie jak blisko przybliżone rozwiązanie $\boldsymbol{r}^{(k)}$ znajduje się względem rozwiązania dokładnego $\boldsymbol{r}$. Im norma błędu rezydualnego jest mniejsza, tym rozwiązanie $\boldsymbol{r}^{(k)}$ jest dokładniejsze. W idealnej sytuacji, jeżeli rozwiązanie zbiegnie się do dokładnego, to błąd rezydualny będzie wektorem zerowym. W Matlabie normę wektora oblicza funkcja `norm`.



Rysunek 1: Macierz $\boldsymbol{M}$ jako suma macierzy trójkątnej dolnej, trójkątnej górnej i diagonalnej

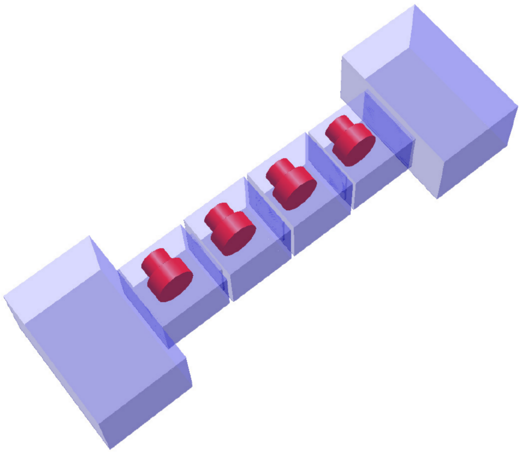
2. Zadania do wykonania

W nawiasach przy nazwach zadania podano ile procent maksymalnej liczby punktów z tego laboratorium można otrzymać za realizację danego zadania.

Uwaga: każdy wykres powinien zawierać tytuł oraz opis osi (polecenia **`xlabel`**, **`ylabel`**, **`title`**).

- **Zadanie A**. Rozpakuj pliki źródłowe zawarte w pliku laboratorium3_kody.zip. Użyj funkcji `[Edges] = generate network(N, density)` do generacji losowej sieci. N jest liczbą stron, `density` jest gęstością połączeń między stronami, `Edges` jest macierzą połączeń, gdzie pierwszy wiersz zawiera indeksy stron z których pochodzi odnośnik, natomiast dolny wiersz zawiera indeksy stron na które wskazuje odnośnik. Użyj parametrów `N = 10`, `density = 3`. Uwaga: kod można napisać w udostępnionym pliku `main_lab3.m` lub w dowolnym innym pliku.
- **Zadanie B**. Skonstruuj macierze rzadkie $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{I}$, $\boldsymbol{M}$ oraz wektor $\boldsymbol{b}$ dla połączeń wygenerowanych w zadaniu A oraz dla parametru $d = 0.85$. Upewnij się, że macierz $\boldsymbol{M}$ jest macierzą rzadką (w tym celu można skorzystać z polecenia **`issparse`**).
- **Zadanie C**. Rozwiąż równanie macierzowe (1) za pomocą metody bezpośredniej (w Matlabie `r = M\b`). Upewnij się, że wszystkie elementy wektora $\boldsymbol{r}$ są nieujemne.
- **Zadanie D** (15%). Zmierz czas bezpośredniego rozwiązania równania macierzowego (1) dla `d = 0.85`, `density = 10` oraz pięciu wartości N: `[500, 1000, 3000, 6000, 12000]`. Czas obliczeń można zmierzyć stosując polecenia **`tic`** oraz **`toc`**. Wygeneruj wykres zależności czasu obliczeń od wartości N. Wykres zapisz do pliku **zadanieD.png**. Uwaga: pomiar czasu obliczeń powinien obejmować tylko czas rozwiązywania równania macierzowego, w szczególności nie powinien on uwzględniać czasu budowy macierzy.
- **Zadanie E** (30%). Zaimplementuj metodę Jacobiego. W tym celu użyj funkcji **`tril`**, **`triu`**, **`diag`** (przykład ich uzycia znajduje się w pliku `main_lab3.m`). Dodaj warunek zatrzymania algorytmu: obliczenia powinny zostać zakończone kiedy norma błędu rezydualnego osiągnie wartość 10^{-14}. Wyznacz czas obliczeń oraz liczbę iteracji dla pięciu wartości N: `[500, 1000, 3000, 6000, 12000]`. Do tego zadania opracuj trzy wykresy: a) czas wyznaczenia rozwiązania w zależności od N (plik **zadanieE_czas.png**), b) liczba iteracji wymagana do osiągnięcia rozwiązania w zależności od N (plik **zadanieE_iteracje.png**), c) wykres normy błędu rezydualnego w kolejnych iteracjach badanego algorytmu dla $N = 1000$ (plik **zadanieE_norma.png**). Wykres normy błędu rezydualnego należy wykonać stosując polecenie **`semilogy`** (oś y w skali logarytmicznej) zamiast polecenia **`plot`**.
- **Zadanie F** (30%). Powtórz zadanie E stosując zamiast metody Jacobiego metodę Gaussa-Seidla. Zapisz wykresy w plikach **zadanieE_czas.png**, **zadanieE_iteracje.png**, **zadanieE_norma.png**. Dodatkowo, zapisz w pliku tekstowym **zadanieF.txt** swoje porównanie badanych metod. Plik tekstowy powinien zawierać odpowiedzi na pytania: a) Która z trzech zbadanych metod okazała się najszybsza? b) Która metoda iteracyjna potrzebuje mniejszej liczby iteracji, żeby zbiec się do prawidłowego wyniku?
- **Zadanie G** (25%). Ostatnie zadanie dotyczy rozwiązania układu równań pochodzącego z analizy elektromagnetycznej filtru mikrofalowego. Zaprojektowanie struktur elektronicznych działających na wysokich częstotliwościach wymaga dokładnego wyznaczenia rozkładu pola elektromagnetycznego w całej dziedzinie obliczeniowej. W tym celu wykonuje się symulacje komputerowe, których najbardziej czasochłonną częścią jest rozwiązanie układu N równań liniowych. Obecnie N często osiąga wartość dziesiątek milionów, a obliczenia trwają wiele godzin, a nawet dni. Podobne obliczenia wykonuje się również w innych symulacjach zjawisk fizycznych stosowanych w inżynierii.

  W celu realizacji zadania G wczytaj dane z pliku *Dane_Filtr_Dielektryczny_lab3_MN.mat*, który zawiera macierz $\boldsymbol{M}$ oraz wektor $\boldsymbol{b}$. Dane te stanowią numeryczną reprezentację filtru działającego w paśmie ok. 10 GHz, który zilustrowano na rys. 2. Rozwiąż układ równań liniowych $\boldsymbol{Mr} = \boldsymbol{b}$ za pomocą trzech poznanych metod. Jaka jest norma błędu rezydualnego dla każdego sposobu rozwiązania równania macierzowego? Czy metody iteracyjne zbiegają się? Zapisz odpowiedzi na te pytania oraz swoje wnioski w pliku **zadanieG.txt**.



Rysunek 2: Filtr mikrofalowy używany m.in. w technice radarowej i systemach satelitarnych

Całkowite sprawozdanie z laboratorium 3 powinno zawierać kody, siedem wykresów w formacie png oraz dwa pliki txt. Wymienione pliki należy skompresować do pliku zip oraz przesłać na stronę eNauczanie.