Grzegorz Fotyga
Piotr Sypek

22 marca 2025

Metody numeryczne, laboratorium 3. Metody rozwiązywania równania macierzowego.

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.

W ramach tego laboratorium rozwiązywane będzie równanie macierzowe (1),

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

gdzie $\boldsymbol{A}$ - macierz,
$\boldsymbol{b}$ - wektor wyrazów wolnych,
$\boldsymbol{x}$ - wektor niewiadomych.

Po wyznaczeniu rozwiązania równania macierzowego wektor $\boldsymbol{x}$ nazywany jest wektorem rozwiązania równania macierzowego.

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 ($\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$), rozkład QR ($\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$), rozkład SVD ($\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T$). 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 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{b}$ można wyznaczyć stosując algorytm podstawienia w przód (ang. *forward substitution*), natomiast rozwiązanie $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{y}$ można wyznaczyć stosując algorytm podstawienia wstecz (ang. *back substitution*).

W metodach numerycznych jedną z powszechnie stosowanych zasad jest:

nigdy nie odwracaj macierzy

w celu wyznaczenia rozwiązania równania macierzowego $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$. 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. Oczywiście, od każdej reguły są wyjątki i np. dopuszczalne jest odwracanie macierzy diagonalnych.

W Matlabie wyznaczenie rozwiązania równania macierzowego można obliczyć przez wywołanie `x = M\b`. W Matlabie operator \ (ang. *backslash*) 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 $\boldsymbol{A}$ można przyjąć, że omawiane wywołanie uruchomi algorytm rozkładu LU.

1.2 Metody iteracyjne

Iteracyjna metoda rozwiązywania równania macierzowego to metoda, która w kolejnych iteracjach wyznacza coraz bardziej dokładne przybliżenie rozwiązania równania macierzowego. Poniżej przedstawiono sposób wyznaczenia dwóch algorytmów metod iteracyjnych: metody Jacobiego i metody Gaussa–Seidla.

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

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

Poglądowe rozbicie macierzy $\boldsymbol{A}$ 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).

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

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

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

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

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

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

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

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

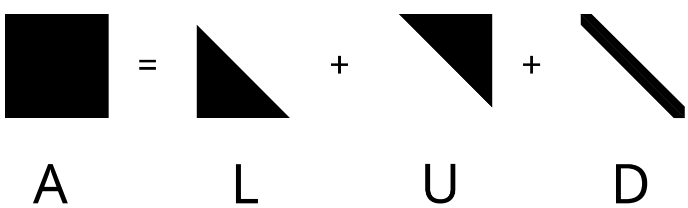
$$\boldsymbol{x}^{(k+1)} = -\left(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L}\right)^{-1}\left(\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}^{(k)}\right) + \left(\boldsymbol{D} + \boldsymbol{L}\right)^{-1}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{M}_{GS}\boldsymbol{x}^{(k)} + \boldsymbol{w}_{GS} \tag{7}$$

UWAGA – 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 residuum jest mniejsza od założonego progu dokładności obliczeń (np. 10^{-5}). Residuum (wektor reszt) $\boldsymbol{r}$ w k-tej iteracji zdefiniowany jest w (8).

$$\boldsymbol{r}^{(k)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}^{(k)} - \boldsymbol{b} \tag{8}$$

Norma residuum umożliwia oszacowanie jak blisko przybliżone rozwiązanie $\boldsymbol{x}^{(k)}$ znajduje się względem rozwiązania dokładnego $\boldsymbol{x}$. Im norma residuum jest mniejsza, tym rozwiązanie $\boldsymbol{x}^{(k)}$ jest dokładniejsze. W idealnej sytuacji, jeżeli rozwiązanie zbiegnie się do dokładnego, to residuum będzie wektorem zerowym. W Matlabie normę wektora można wyznaczyć stosując funkcję `norm`.



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

2 Zadania do wykonania

W ramach trzeciego laboratorium z Metod Numerycznych należy wykonać siedem zadań Matlab Grader udostępnionych na stronie eNauczanie. Punktacja otrzymana podczas weryfikacji poprawności kodu przy pomocy MATLAB Grader (MG) stanowi wstępną punktację za laboratorium. Tab. 1 przedstawia sposób punktowania zadań.

Uwaga: prawidłowość danych przedstawionych na wykresach stanowiących zawartość sprawozdania (plik zip) jest wymagana do utrzymania oceny wstępnej wygenerowanej w MATLAB Grader.

Numer zadania	Skrócony opis zadania	Punkty MATLAB Grader	Wstępna punktacja za laboratorium
Zadanie 1	Metoda bezpośrednia	8	0,8
Zadanie 2	Metoda bezpośrednia benchmark	5	0,5
Zadanie 3	Metoda Jacobiego	8	0,8
Zadanie 4	Metoda Jacobiego benchmark	5	0,5
Zadanie 5	Metoda Gaussa-Seidla	8	0,8
Zadanie 6	Metoda Gaussa-Seidla benchmark	5	0,5
Zadanie 7	Filtr mikrofalowy	11	1,1

Tabela 1: Punkty do zdobycia za prawidłowe wykonanie zadań z laboratorium 3

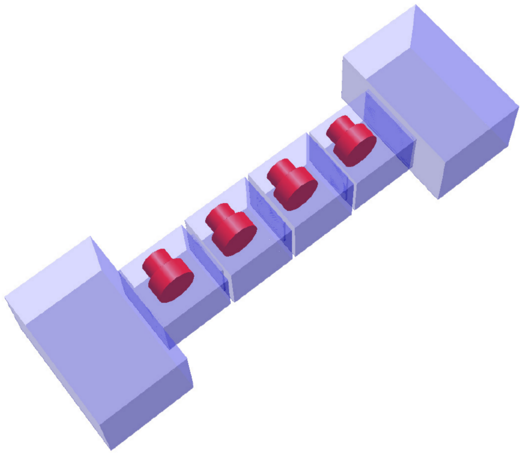
2.1 Filtr mikrofalowy

Zadanie 7 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 mogą trwać wiele godzin, a nawet dni. Podobne obliczenia wykonuje się również w innych symulacjach zjawisk fizycznych stosowanych w inżynierii.

W celu realizacji zadania 7 wczytaj dane z pliku filtr_dielektryczny.mat, który zawiera macierz $\boldsymbol{A}$ oraz wektor $\boldsymbol{b}$. Dane te stanowią numeryczną reprezentację filtru działającego w paśmie ok. 10 GHz, który zilustrowano na rys. 2. Napisz skrypt, który zastosuje trzy poznane przez Ciebie metody w celu rozwiązania równania $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$. Jaka jest norma residuum dla każdego sposobu rozwiązania równania macierzowego? Czy metody iteracyjne zbiegają się? Zapisz odpowiedzi na te pytania oraz swoje wnioski w pliku **zadanie7.txt**. Maksymalną punktację za to zadanie można otrzymać jeśli zarówno skrypt będzie prawidłowo napisany jak i wnioski zawarte w pliku txt będą właściwe.

2.2 Podsumowanie

Całkowite sprawozdanie z laboratorium 3 powinno zawierać kody, sześć wykresów w formacie png oraz jeden plik txt. Dodatkowo do sprawozdania można dołączyć wykresy do zadania 7 przedstawiające normę residuum w kolejnych iteracjach. Wymienione pliki należy skompresować do pliku zip oraz przesłać na stronę eNauczanie.



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