Министерство образования и науки Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ Робототехники и комплексной автоматизации

КАФЕДРА Системы автоматизированного проектирования (РК-6)

ОТЧЕТ О ВЫПОЛНЕНИИ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Студент Лубянов Александр Дмитриевич

Группа РК6-62Б

Тип задания лабораторная работа

Тема лабораторной работы Метод сопряженных градиентов

Студент __________________ _ **Лубянов А. Д.**___
подпись, дата *фамилия, и.о.*

Преподаватель __________________ ___**Першин А.Ю.**____
подпись, дата *фамилия, и.о.*

Преподаватель __________________ _ **Соколов А.П.**_____
подпись, дата *фамилия, и.о.*

Оценка ____________________________________

Москва, 2019 г.

Оглавление

Задание на лабораторную работу

Задача 11 (Метод сопряженных градиентов)

Дано двумерное уравнение Пуассона, являющееся общей формой стационарного уравнения теплопроводности и описывающее стационарное поле температуры:

$$-\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = f(x, y), \qquad (1)$$

где $T = T(x, y)$ – температура в точке (x, y), $f(x, y) = 1$ – функция тепловых источников, описывающая в данном случае равномерный нагрев. Рассматривается пространство $(x, y) \in [0; 1] \times [0; 1]$, а также однородные (т.е. нулевые) граничные условия: $T(x, 0) = T(0, y) = T(x, 1) = T(1, y) = 0$.

Требуется:

1. Построить разрешающую СЛАУ, проведя дискретизацию пространства с помощью замены частных производных в данном уравнении формулой численного дифференцирования второго порядка для второй производной (см. лекцию 4). Для этого необходимо построить сетку с помощью равномерно распределенных узлов:
$$\mathrm{x_i = ih, \qquad i = 0, \dots, N,}$$
$$\mathrm{y_j = jh, \qquad j = 0, \dots, N,}$$
где $\mathrm{h} = \frac{1}{\mathrm{N}}$ и $\mathrm{N} + 1$ является числом узлов вдоль каждой из координат. Формула численного дифференцирования относительно определенной координаты применяется так, что вторая координата рассматривается зафиксированной. Вектором решения СЛАУ должен быть модифицированный вектор
$\mathrm{T = [T_{0,0}\,, T_{1,0}, \dots, T_{N,0}, T_{0,1}, T_{1,1}, \dots, T_{N,2}, \dots, T_{N-1,N} T_{N,N}]}$,
где $\mathrm{T_{i,j} = T(x_i y_j)}$, из которого следует исключить элементы, связанные с заданными граничными условиями. Из матрицы коэффициентов так же должны быть исключены строки и столбцы, ассоциированные с граничными условиями. Матрицу коэффициентов желательно представить в виде блочной матрицы.
2. Описать свойства полученной матрицы:
    - Является ли матрица положительно определенной?
    - Является ли матрица ленточной? Если да, вычислите ширину ленты.
    - Обладает ли матрица строгим (нестрогим) диагональным преобладанием?

3. Сделать вывод о применимости метода сопряженных градиентов и вычислительной устойчивости/неустойчивости решения, исходя из свойств матрицы.
4. Написать функцию *conjugate_gradient(A, b, C_inv, eps)*, которая возвращает решение СЛАУ, построенной из матрицы коэффициентов A и правого вектора b, со среднеквадратичной нормой вектора невязки меньше eps и матрицей предобуславливания C_inv, которая по умолчанию равна единичной матрице. Решение должно производиться с помощью метода сопряженных градиентов.
5. Найти решение СЛАУ, полученной в первом пункте, с помощью функции conjugate_gradient при $N = 9$ и $N = 17$ и среднеквадратичной норме вектора невязки строго меньше 10^{-4}:
   - Укажите получившиеся размерности матриц коэффициентов и оцените, сколько требуется памяти для хранения этих матриц в памяти компьютера в предположении, что каждый элемент матрицы представляется в виде числа с двоичной точностью;
   - Для каждого N выведите на экран линии уровня решения;
   - Сравните результаты и сделайте вывод.
6. Для N=17 построить график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов. Для этого необходимо модифицировать функцию conjugate_gradient так, чтобы она дополнительно возвращала среднеквадратичную норму вектора невязки на каждой итерации. Ось ординат на графике должна быть отображена в логарифмической шкале.
7. Найти решение СЛАУ при N=17, среднеквадратичной норме вектора невязки строго меньше 10^{-4} и матрице предобуславливания $D^{-\frac{1}{2}}$, состоящей из корней от обратных диагональных элементов оригинальной матрицы коэффициентов (недиагональные элементы этой матрицы равны нулю).
8. Для полученного решения построить график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов, сравнить график с соответствующим графиком, построенным в случае отсутствия предобуславливания, и сделать вывод. [1]

Цель выполнения лабораторной работы

Цель выполнения лабораторной работы – овладеть методом сопряженных градиентов для решения СЛАУ. На практике оценить его эффективность и сделать выводы о свойствах метода.

Задачи, выполненные в процессе реализации лабораторной работы

1. Сгенерированы матрица коэффициентов и вектор правых частей для решения СЛАУ, решающую задачу теплопроводности.
2. Описаны свойства полученной матрицы.
3. Разработана функция *conjugate_gradient(A, b, C_inv, eps)*, которая возвращает решение СЛАУ, построенной из матрицы коэффициентов A и правого вектора b, со среднеквадратичной нормой вектора невязки меньше eps и матрицей предобуславливания C_inv.
4. Найдено решение СЛАУ при различных значениях узлов, выведены линии уровня решения.
5. Построены графики зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов при различных матрицах обуславливания и сделан вывод об их влиянии на результаты вычислений.

Метод сопряженных градиентов

В процессе работы были сгенерированы матрица коэффициентов температур M и вектор правых частей R для решения СЛАУ. При количестве узлов N (для удобства количество узлов обозначено N, а не N+1) размерность матрицы M равна N^2 на N^2, вектора R и получившегося в результате решения системы вектора T - N^2 элементов.

Матрица коэффициентов заполняется по следующим правилам:

1. Сначала учитываются граничные условия $T(x, 0) = T(0, y) = T(x, 1) = T(1, y) = 0$. В соответствующее место в матрицу M, которая изначально заполнена нулевыми значениями, записывается значение равное 1, а в вектор R – 0.
2. Затем заполняются значения для остальных узлов, значения которых удовлетворяют условию (1). Иначе его можно записать в таком виде:

$$-\frac{T(x_{i-1}, y_j) - 2T(x_i, y_j) + T(x_{i+1}, y_j)}{(\Delta x)^2} - \frac{T(x_i, y_{j-1}) - 2T(x_i, y_j) + T(x_i, y_{j+1})}{(\Delta y)^2} = 1. \quad (2)$$

В нашем случае $\Delta x = \Delta y = h$, где $h = \frac{1}{N-1}$. Подставив эти значения в (2) и сгруппировав подобные члены, получается уравнение:

$$T(x_{i-1}, y_j) * \frac{-1}{h^2} + T(x_i, y_j) * \frac{4}{h^2} + T(x_{i+1}, y_j) * \frac{-1}{h^2} + T(x_i, y_{j-1}) * \frac{-1}{h^2} + T(x_i, y_{j+1}) * \frac{-1}{h^2} = 1. \quad (3)$$

Уравнение (3) можно составить для каждого неграничного узла и записать соответствующие множители при T в матрицу коэффициентов. Элементы вектора правых частей, которые соответствуют этим узлам, равны 1.

Затем из матрицы и двух векторов исключаются элементы, связанные с заданными граничными условиями. Пример матрицы коэффициентов M после преобразования при количестве узлов N = 5 показан на рисунке 1.

```
[[ 64. -16.   0. -16.   0.   0.   0.   0.   0.]
 [-16.  64. -16.   0. -16.   0.   0.   0.   0.]
 [  0. -16.  64.   0.   0. -16.   0.   0.   0.]
 [-16.   0.   0.  64. -16.   0. -16.   0.   0.]
 [  0. -16.   0. -16.  64. -16.   0. -16.   0.]
 [  0.   0. -16.   0. -16.  64.   0.   0. -16.]
 [  0.   0.   0. -16.   0.   0.  64. -16.   0.]
```

Рисунок 1. Матрица коэффициентов после преобразования при N = 5

Проведена проверка, обладает ли матрица M следующими свойствами:

- Положительно определенная.

Матрица является положительно определённой, если верно неравенство $x^TAx > 0,\ x \neq 0$ [2]. Проверим, удовлетворяет ли получившаяся матрица M этому условию на примере, когда количество узлов N = 5 (рисунок 1). Для этого введем вектор $x^T = [x_0, \ldots x_8],\ x^T \neq 0$. Выполнив перемножение, получим:

$$64x_0^2 - 32x_0x_1 - 32x_0x_3 + 64x_1^2 - 32x_1x_2 - 32x_1x_4 + 64x_2^2 - 32x_2x_5 + 64x_3^2 - 32x_3x_4 - 32x_3x_6 + 64x_4^2 - 32x_4x_5 - 32x_4x_7 + 64x_5^2 - 32x_5x_8 + 64x_6^2 - 32x_6x_7 + 64x_7^2 - 32x_7x_8 + 64x_8^2 = 32x_0^2 + (4x_0 - 4x_1)^2 + (4x_0 - 4x_3)^2 + 16x_1^2 + (4x_1 - 4x_2)^2 + (4x_1 - 4x_4)^2 + 32x_2^2 + (4x_2 - 4x_5)^2 + 16x_3^2 + (4x_3 - 4x_4)^2 + (4x_3 - 4x_6)^2 + (4x_4 - 4x_5)^2 + (4x_4 - 4x_7)^2 + 16x_5^2 + (4x_5 - 4x_8)^2 + 32x_6^2 + (4x_6 - 4x_7)^2 + 16x_7^2 + (4x_7 - 4x_8)^2 + 32x_8^2 \geq 0 \quad (4)$$

Аналогично для матриц при других значениях N. Значит, полученная матрица коэффициентов M положительно определённая.

- Ленточная.

На главной (нулевой) диагонали матрицы находятся коэффициенты текущего узла. На 1 и -1 диагоналях – узлов справа и слева от текущего соответственно. На N-2 и –(N-2) диагоналях записаны коэффициенты узлов сверху и снизу от рассматриваемого соответственно.

Таким образом, матрица является ленточной. Ширина ленты зависит от количества узлов N и равна (N-2)*2+1.

- Со строгим (нестрогим) диагональным преобладанием.

Т.к. уравнение для каждого неграничного имеет вид (3), на главной диагонали находятся элементы, которые вычисляются по формуле:

$$K_д = \frac{4}{h^2}. \quad (5)$$

При этом остальные ненулевые элементы матрицы находятся по формуле:

$$K_{нд} = \frac{-1}{h^2}. \quad (6)$$

В каждой строке находится не более 4 ненулевых элемента. Исходя из неравенства (7) матрица обладает нестрогим диагональным преобладанием:

$$|К_д| \geq \sum |K_{нд}|. \quad (7)$$

Исходя из свойств матрицы, можно сделать вывод, что для решения СЛАУ вида Mx=b можно применить метод сопряженных градиентов (т.к. матрица положительно определенная, она симметрична). Более того, решение такой СЛАУ будет устойчивым, т.к. матрица невырожденная (исходя из диагонального преобладания).

Разработана функция *conjugate_gradient(A, b, C_inv, eps)*, которая возвращает решение СЛАУ, полученное методом сопряженных градиентов. A – матрица коэффициентов, b - правый вектор, eps – максимально допустимая среднеквадратичной норма вектора невязки, C_inv - матрица предобуславливания.

С помощью этой функции найдено решение СЛАУ, полученной ранее, при количестве узлов N = 10 и N = 18, среднеквадратичная норма вектора невязки строго меньше 0.0001. Размерность матрицы коэффициентов в этих случаях - 64 на 64 и 256 на 256 элементов, для хранения в памяти компьютера необходимо 32768 и 524288 байт соответственно.

Для N = 10, N = 18, а также для промежуточного N = 14 выведены на экран линии уровня решения (рисунки 2 – 4).

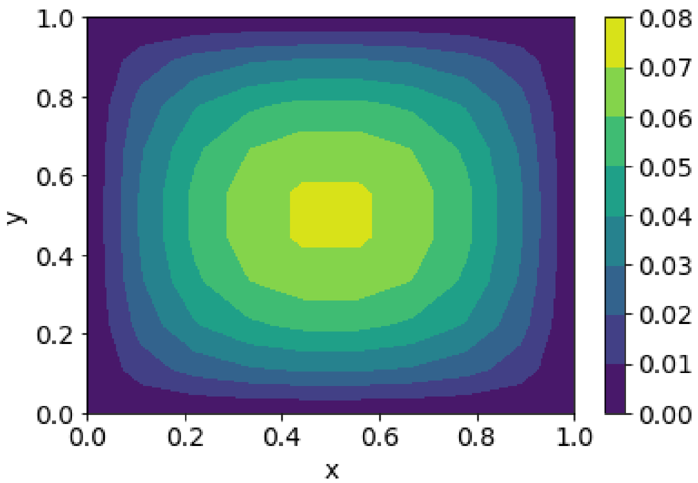

Рисунок 2. Линии уровня решения СЛАУ при N = 10

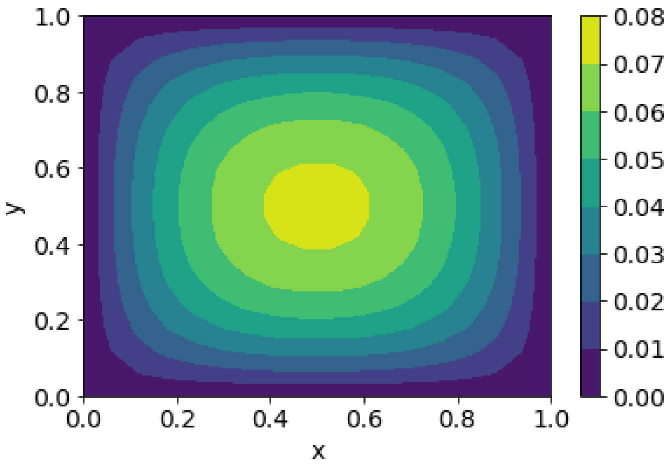

Рисунок 3. Линии уровня решения СЛАУ при N = 18

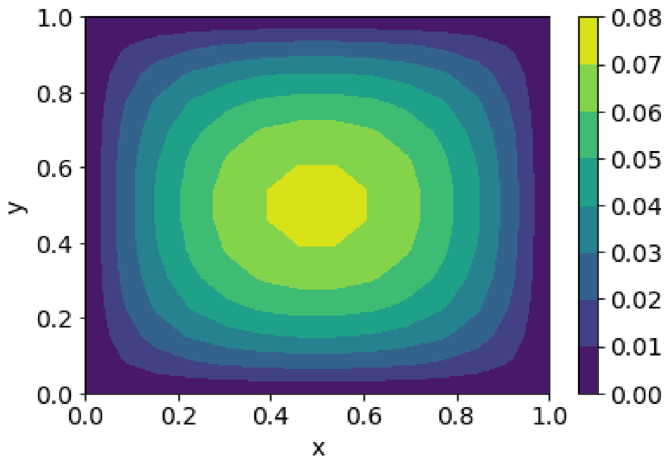

Рисунок 4. Линии уровня решения СЛАУ при N = 14

При увеличении количества узлов возрастает точность решения.

Для N = 18 построен график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов. Он представлен на рисунке 5.

Также при N = 18 найдено решение СЛАУ с использованием матрицы предобуславливания, состоящей из корней от обратных диагональных элементов оригинальной матрицы коэффициентов. График зависимости нормы вектора невязки от номера итерации показан на рисунке 6.

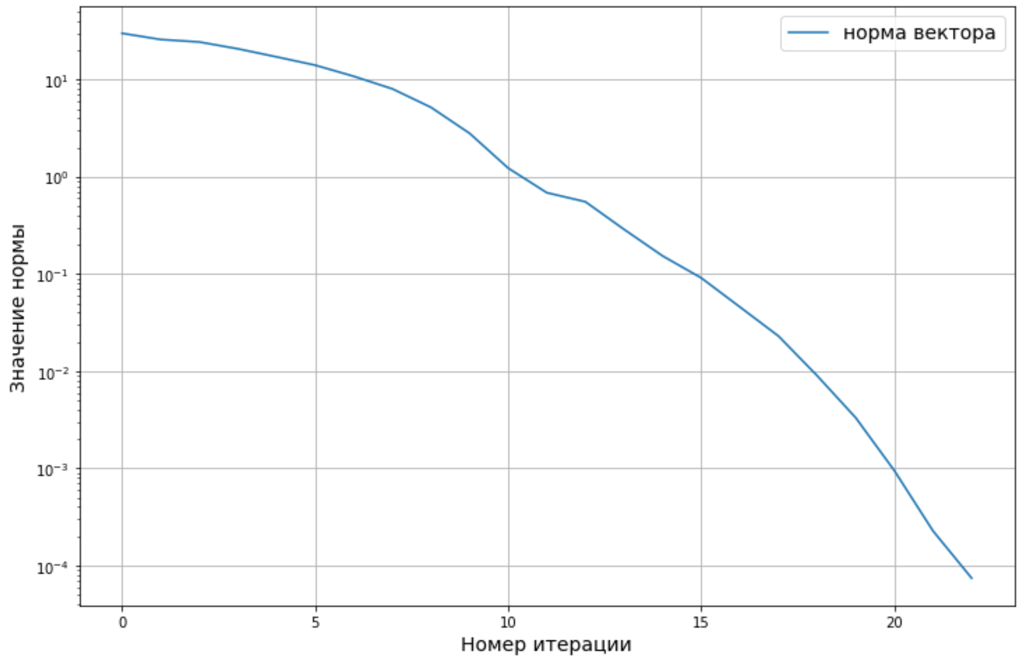

Рисунок 5. График зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов

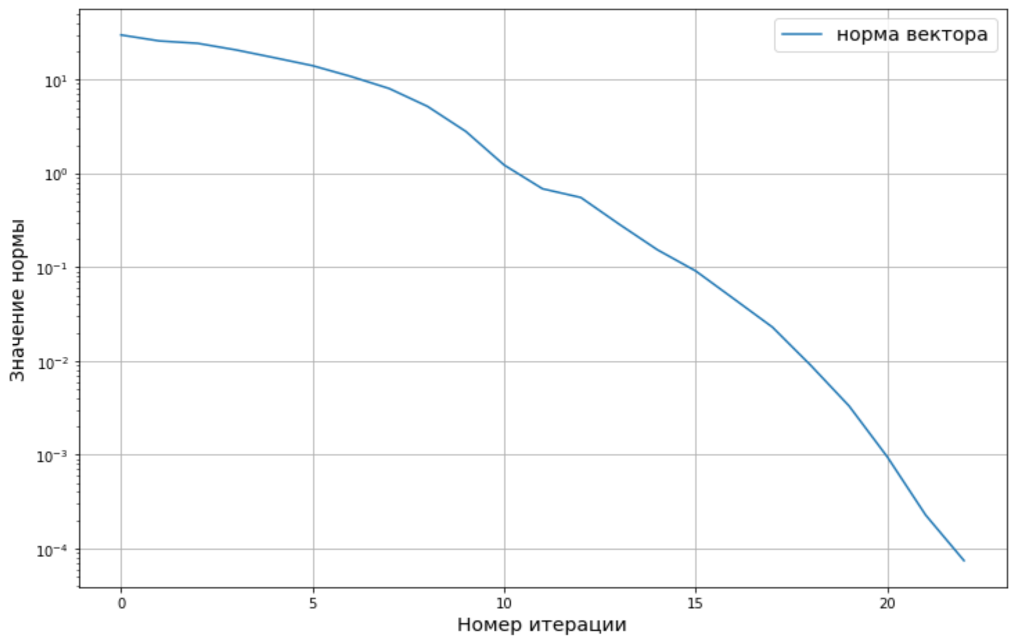

Рисунок 6. График зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов при использовании другой матрицы обуславливания

Графики, представленные на рисунках 5 и 6 совпадают. Замена матрицы обусловленности не повлияла вид графика, потому что новая матрица не изменила число обусловленности матрицы M. [3]

Заключение

В ходе лабораторной работы был реализован метод сопряженных коэффициентов для решения СЛАУ для решения задачи теплопроводности

Выявлено, что число узлов увеличивает точность решения, замена матрица обуславливания не влияет на ход решения в случае хорошо обусловленной матрицы коэффициентов.

Список использованных источников

[1] Соколов, А.П., Першин, А.Ю. Инструкция по выполнению лабораторной работы (общая). Соколов, А.П., Першин, А.Ю., Москва, 2018.

[2] Першин, А.Ю. Лекции по вычислительной математике. Першин А.Ю., Москва, 2019.

[3] Число обусловленности [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/Число_обусловленности – (Дата обращения: 24.05.2019).