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	Никифорова Ирина Андреевна
Группа	РК6-61б
Тип задания	лабораторная работа
Тема лабораторной работы	Метод сопряженных градиентов.

Студент ____________________ **Никифорова И. А.**
подпись, дата *фамилия, и.о.*

Преподаватель ____________________ **Соколов А. П.**
подпись, дата *фамилия, и.о.*

Преподаватель ____________________ **Першин А. Ю.**
подпись, дата *фамилия, и.о.*

Оценка ____

Москва, 2019 г.

Оглавление

Задание на лабораторную работу

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

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

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:

$$x_i = ih, \quad i = 0, ..., N, \tag{2}$$

$$y_j = jh, \quad j = 0, ..., N, \tag{3}$$

где $h = \frac{1}{N}$ и $N + 1$ 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:

$$\boldsymbol{T} = [T_{0,0}, T_{1,0}, \ldots, T_{N,0}, T_{0,1}, T_{1,1}, \ldots, T_{N,2}, \ldots, T_{N-1,N}, T_{N,N}] \tag{4}$$

где $T_{i,j} = T(x_i, y_j)$, из которого следует исключить элементы, связанные с заданными граничными условиями. Из матрицы коэффициентов также 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 строго 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 двойной 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 $D^{-1/2}$, состоящей из корней от обратных диагональных элементов оригинальной матрицы коэффициентов (внедиагональные элементы этой матрицы равны нулю).

8. Для полученного решения построить график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов, сравнить полученный график с соответствующим графиком, построенным в случае отсутствия предобуславливания, и сделать вывод.

Цель выполнения лабораторной работы

Цель выполнения лабораторной работы – с помощью дискретизации двумерного уравнения Пуассона построить СЛАУ. Решить ее с помощью метода сопряженных градиентов.

Задачи, выполненные в процессе реализации лабораторной работы

1. Метод сопряженных градиентов

Метод сопряженных градиентов

Для построения разрешающей СЛАУ двумерного уравнения Пуассона (1) была проведена дискретизация пространства, путем замены частных производных второго порядка на формулу ее численного дифференцирования. Формула численного дифференцирования второго порядка точности для второй производной в точке x_1 имеет вид (остаточный член далее был опущен)[2]:

$$f''(x_1) = \frac{f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)}{h^2} - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \text{ где } \xi \in [x_1 - h;\ x_1 + h] \quad (5)$$

Функция T в формуле (1) в отличие от функции f в формуле (5) зависит от двух параметров - (x, y). Кроме того, производная в формуле (1) является частной, поэтому при ее взятии по одному параметру, второй должен оставаться неизменным.

После подстановки (с учетом описанных выше замечаний) формулы (5) в формулу (1)и наложения сетки, уравнение Пуассона в точке (x_i, y_j) приняло вид:

$$-\frac{T(x_i - h_x,\ y_j) - 2T(x_i,\ y_j) + T(x_i + h_x,\ y_j)}{h_x^2} - \frac{T(x_i,\ y_j - h_y) - 2T(x_i,\ y_j) + T(x_i, y_j + h_y)}{h_y^2} = f(x_i,\ y_j) \quad (6)$$

После этого было учтено, что шаги сетки в направлении обеих координат равны между собой и составляют $h = \frac{1}{N}$, где $N+1$ - количество узлов вдоль каждой из координат, что $x_i - h = x_{i-1}$ и, аналогично, для y_j. Была подставлена функция тепловых источников $f(x, y) = 1$ (по условию). В результате получилось следующее уравнение:

$$N^2(-T(x_{i-1}, y_j) - T(x_{i+1}, y_j) - T(x_i, y_{j-1}) - T(x_i, y_{j+1}) + 4T(x_i, y_j)) = 1 \quad (7)$$

Перед представлением общего вида матрицы для решения СЛАУ из нее были исключены строки и столбцы, отвечающие за граничные условия.

За верхнее граничное условие отвечает нулевая строка, за нижнее - N строка, т.к. количество элементов в сетке по одной оси - $N + 1$.

Левое и правое граничное условие исключить сложнее. За левое граничное условие отвечают температуры $T(k,\ 0)$, где $k \in [\ 0;\ N\ ]$, в модифицированном векторе (4) это будут элементы с индексами $i \in \{\ 0,\ N{+}1,\ 2(N{+}1)\ \dots\ (N{+}1)^2\ \}$ (каждый N+1 элемент, начиная с нулевого; например, для матрицы температур 6х6 это будут $i \in \{\ 0,\ 7,\ 14,\ \dots\ ,\ 49\ \}$ элементы модифицированного вектора). Соответственно, нужно исключить их и строки с такими же индексами в матрице коэффициентов. Аналогично, для правого граничного условия это будут элементы модифицированного вектора и строки с индексами $i \in \{\ N{+}1{-}1,\ 2(N{+}1){-}1,\ 3(N{+}1){-}1,\ \dots,\ (N{+}1)^2 + \mathrm{N}\}$ (для для матрицы 6х6 - $i \in \{\ 6,\ 13,\ 20\ ,\ \dots\ ,\ 55\ \}$).

Учитывая исключение граничных условий, модифицированный вектор неизвестных узловых температур будет выглядеть следующим образом:

$$\boldsymbol{T} = [T_{i,j}]\text{, где } i,j \in [1; N-1] \tag{8}$$

Каждое уравнение Пуассона для узла *(i,j)* будет задействовать элементы $T_{i,j}$, $T_{i+1,j}$, $T_{i-1,j}$, $T_{i,j+1}$, $T_{i,j-1}$. Коэффициенты перед ними должны располагаться на одной строке, чтобы составлять одно уравнение, значит, они будут находиться на диагонали, справа и слева от нее, а также на расстоянии N-1 вправо и влево от диагонали соответственно. Таким образом, коэффициенты будут соответствовать своим множителям из модифицированного вектора узловых температур. Если для данного уравнения невозможно поставить какой либо из коэффициентов в силу того, что его индекс выходит за границу матрицы - это значит, что данный узел взаимодействует с граничными, а значит, учитывать данный коэффициент не нужно, т.к. он обнулится из-за нулевого граничного условия. Из этого следует, что на диагонали у матрицы коэффициентов А будут стоять $4N^2$. Вокруг главной диагонали будет образована лента из коэффициентов $-1N^2$ - это коэффициенты при $T_{i+1,j}$, $T_{i-1,j}$ (которые будут присутствовать везде, кроме перехода от j к j+1, т.к. для данного перехода действует граничное условие, которое исключено), а на расстоянии N-1 справа и слева, если это возможно, будут стоять коэффициенты при $T_{i,j+1}$, $T_{i,j-1}$ - также $-1N^2$. В целом, матрица А будет иметь размерность $(N-1)^2 \times (N-1)^2$ и, если представить ее блочно, она будет выглядеть следующим образом (везде далее незаполненные клетки равны нулям) :

D	E			
E	D	E		
	….	...	...	
		E	D	E
			E	D

(9)

В матрице (9) блок E - единичная матрица размером $(N-1)\times(N-1)$, умноженная на скаляр $-N^2$, блок D - трехдиагональная, бисимметричная[3] матрица размером $(N-1)\times(N-1)$, которая имеет вид:

$4N^2$	$-1N^2$			
$-1N^2$	$4N^2$	$-1N^2$		
	….	...	...	
		$-1N^2$	$4N^2$	$-1N^2$
			$-1N^2$	$4N^2$

(10)

Полная матрица (9) является блочно-трехдиагональной, т.к. ее ненулевые блоки располагаются на и вокруг диагонали.

Согласно определению, матрица называется положительно определенной, если она симметрична и верным является неравенство:

$$x^T A x \ > \ 0, \qquad \forall \ x \ \neq 0 \tag{11}$$

Левую часть неравенства (11) можно представить в виде суммы:

$$x^T A x \ = \sum_{i=0}^{n} \sum_{j=0}^{n} a_{ij} \, x_i \, x_j \tag{12}$$

Для матрицы (9) сумма (12) примет вид:

$$x^T A x \ = \sum_{k=0}^{n} 4N^2 \, x_k^2 \ - \sum_{i=N-1}^{n} N^2 \, x_i \, x_{i-N+1} \ - \sum_{j=N-1}^{n} N^2 \, x_{j-N+1} \, x_j \tag{13}$$

Из выражения (13) видно, что условие (11) выполняется, значит, можно говорить о том, что матрица (9) является положительно определенной.

Квадратную матрицу можно назвать ленточной, если существуют такие $p, q \in \mathbb{Z}$, где $1 < p,\ q < N$, что $j-i \geq p \Rightarrow a_{ij} = 0$ и $i-j \geq q \Rightarrow a_{ij}=0$. Ширина ленты при этом определяется как $w=p+q-1$. Для матрицы (9) это условие выполняется, так как если отступить от диагонали более или равно, чем на N, значения в матрице гарантированно будут равны нулю. Ширина ленты для нее составляет $w = 2N - 1$.

Матрица (9) обладает нестрогим диагональным преобладанием, т.к. для всех ее элементов выполняется неравенство [1]:

$$|a_{kk}| \geq \sum_{j \neq i} |a_{ij}|, \quad i = 1, \ldots, N \tag{14}$$

При номере строки *k*, таком что *k*-й элемент вектора неизвестных температур будет являться соседним к граничному, неравенство будет выполняться строго. Оно также будет выполняться строго для первых и последних *N* строк. В остальных случаях оно будет превращаться в равенство.

Так как матрица *A* (9) является положительно определенной и невырожденной, для нее можно применять метод сопряженных направлений. При этом, если она плохо обусловлена, то необходимо предобуславливать ее, иначе метод будет иметь медленную сходимость. [2]

Для нахождения решения СЛАУ методом сопряженных градиентов, была написана функция *conjugate_gradient*(*A, b, C_inv, eps*), которая выполняет предобуславливание матрицы *A*, задает начальные условия и возвращает результат вызова функции *conj_grad_recursive(A, x_prev, r_prev, v)*.

Функция *conj_grad_recursive(A, x_prev, r_prev, v)* - рекурсивная функция, реализующая алгоритм метода сопряженных градиентов, используя формулы для *k*-той итерации:

$$t_k = \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle}{\langle v^{(k)}, Av^{(k)} \rangle} \tag{15}$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k v^{(k)} \tag{16}$$

$$r^{(k)} = r^{(k-1)} + t_k Av^{(k)} \tag{17}$$

$$S_k = \frac{\langle r^{(k)}, r^{(k)} \rangle}{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)} \rangle} \tag{18}$$

$$v^{(k+1)} = r^{(k)} + S_k v^{(k)} \tag{19}$$

Можно отметить, что алгоритм также можно реализовать в цикле - таким образом можно избежать ошибки переполнения стека вызовов при слишком большой степени рекурсии.

С помощью написанной функции было найдено решение СЛАУ для $N = 9$ и $N = 17$, $eps = 10^{-4}$. Размерности матриц для СЛАУ составили соответственно 64×64 и 256×256 элементов. Если бы они хранились в памяти компьютера с двойной точностью, их размер в памяти составил бы 23 Кбайт и 512 Кбайт соответственно.

Для каждого из решений были построены графики по пространственным координатам и температуре. Они представлены на рисунках 1 и 2.

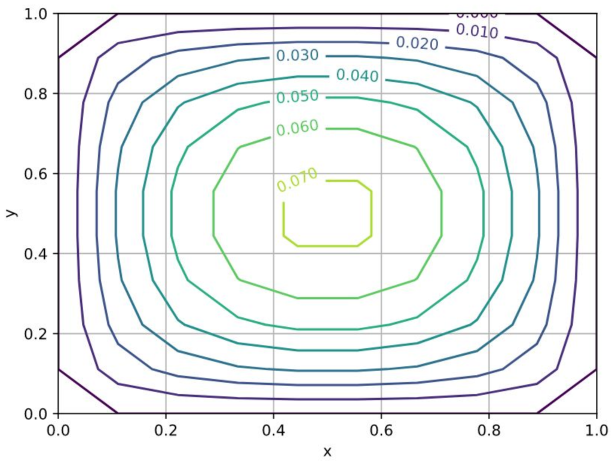

Рис. 1. График для $N = 9$

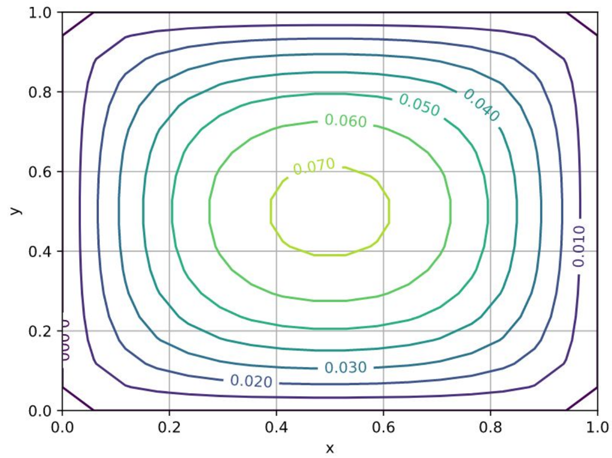

Рис. 2. График для $N = 17$

Как видно из рисунков 1 и 2, при большем количестве узлов, с помощью данного метода можно получить более гладкое решение с меньшей ошибкой.

Кроме того, для случая $N = 17$ был также построен график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации (рис. 3).

На графике (рис. 3) видно, что с каждой итерацией вектор невязки уменьшается, что свидетельствует о приближении получаемого решения к реальному решению. При этом, на каждой итерации, вектор уменьшается приблизительно в одинаковое число раз. Скачок вверх в самом начале графика говорит о неточности начального приближения.

Также был проведен анализ степени обусловленности матрицы. Для этого было найдено решение при $N = 17$, среднеквадратичной норме вектора невязки строго меньше 10^{-4} и матрице предобуславливания $D^{-1/2}$, состоящей из корней от обратных диагональных элементов оригинальной матрицы коэффициентов (внедиагональные элементы этой матрицы равны нулю). Был построен график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации, и он полностью совпал с графиков для непредобусловленной матрицы, что лишь свидетельствует о том, что исходная матрица (9) является хорошо обусловленной.

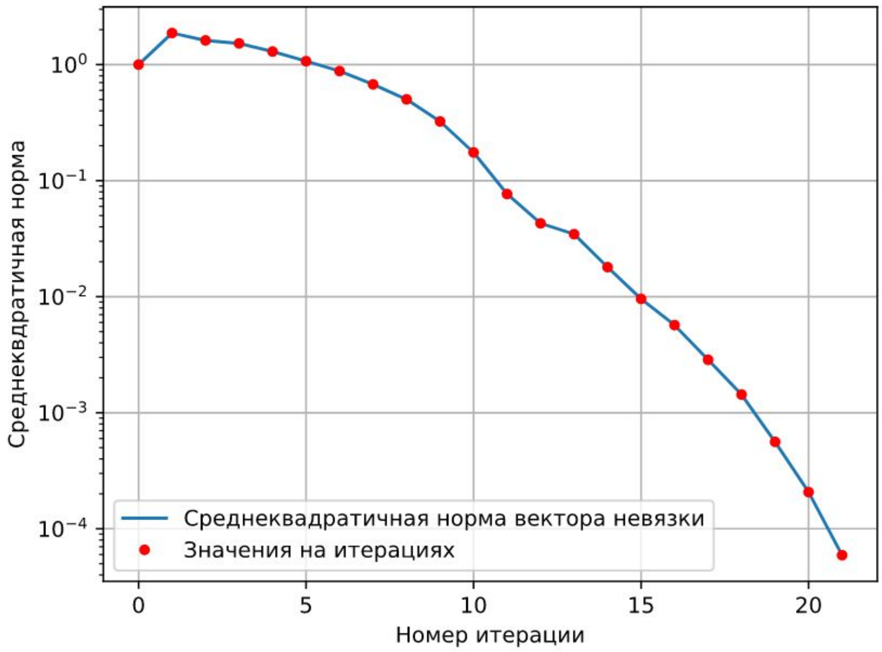

Рис. 3. Зависимость среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов для $N = 17$

Заключение

В ходе лабораторной работы была написана рекурсивная реализация алгоритма метода сопряженных градиентов. Было построено разностное (дискретизированное по пространству) уравнение Пуассона для температуры в точке температурного поля и составлен общий вид СЛАУ для его решения. СЛАУ для различного количества узлов в сетке были решены с помощью написанного градиентного метода. Были сделаны выводы о влиянии количества узлов сетки и предобуславливания матрицы коэффициентов на решение с помощью данного метода.

Список использованных источников

1. Першин А.Ю. *Лекции по вычислительной математике (черновик)* [Электронный ресурс] // Кафедра РК6 (Системы автоматизированного проектирования), МГТУ им. Н.Э. Баумана, 4 марта 2019 г.
2. Першин А.Ю. *Лекции по вычислительной математике. Презентации.* [Электронный ресурс]
3. https://ru.wikipedia.org/wiki/Список_матриц [Электронный ресурс]
4. https://ru.wikipedia.org/wiki/Число_двойной_точности [Электронный ресурс]