

METODY NUMERYCZNE: INSTRUKCJA 1

Na tych laboratoriach skupimy się na rozwiązywaniu układu:

$$Ax = b$$

Naszym celem będzie więc napisanie funkcji `Solve` zastępującej funkcję `Gauss`. Nie będziemy jednak tego układu rozwiązywać metodą bezpośrednią, taką jak eliminacja Gaussa, ale metodą iteracyjną. Tzn: będziemy konstruować kolejne przybliżenia $x^{(n)}$ dokładnego x , takie że $b - Ax^{(n)}$ będzie coraz bliższe zeru. $r = b - Ax^{(n)}$ nazywamy **residual'em**.

Zadanie 1 Policz *residual*. Następnie policz i wyświetl jego normę: $\|r\| = \sqrt{r^T r}$ (napisz funkcję liczącą normę wektora `norm(double *,int)`). Ile wynosi ta norma przed i po rozwiązaniu układu metodą eliminacji Gaussa?

1 Na głupa

Pierwszym pomysłem na iteracyjne rozwiązywanie byłoby postawienie:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} + p$$

Gdzie p jest „poprawką” w iteracji. Łatwo sprawdzić, że idealne p byłoby równe:

$$p = A^{-1}r$$

Jednak nie mamy A^{-1} (w tym rzecz). Zamiast niej użyjemy M^{-1} , gdzie M będzie przybliżeniem A . Macierz M^{-1} nazywamy **preconditioner'em**. Na początek zamiast rozwiązywać pełen układ, pominiemy większość jego elementów:

$$\begin{aligned} A_{11}p_1 + A_{12}p_2 + A_{13}p_3 + \dots + A_{1n}p_n &= r_1 \\ A_{21}p_1 + A_{22}p_2 + A_{23}p_3 + \dots + A_{2n}p_n &= r_2 \\ A_{31}p_1 + A_{32}p_2 + A_{33}p_3 + \dots + A_{3n}p_n &= r_3 \\ \dots & \\ A_{n1}p_1 + A_{n2}p_2 + A_{n3}p_3 + \dots + A_{nn}p_n &= r_n \end{aligned}$$

Co daje nam prosty wzór na p :

$$p_i = \frac{1}{A_{ii}}r_i$$

Jest to równoważne z wzięciem za M diagonalnej części A . Ten prosty schemat iteracji, z powyższą poprawką nazywamy **metodą Jacobiego**.

Zadanie 2 Zaczynając od $x = 0$ powtarzaj tę prostą iterację (np. 1000 razy). W każdej iteracji wyświetlaj normę residualu, a także wywołaj funkcję `draw_residual(double)` by wykonać wykres zbieżności.

Tak wykonana iteracja się nie zbiega. Wprowadźmy współczynnik, który „przytłumi” wykonywane iteracje:

$$x^{(n+1)} = x^{(n)} + \alpha p$$

Zadanie 3 Sprawdź zbieżność tego schematu przy różnych α . Sprawdź 0.5, 0.9, 1.1 i 2.

Zadanie 4 Wydziel z funkcji `Solve` część odpowiedzialną za mnożenie przez A : `Mult(double** A, double*x, double* r)` i `preconditioner`: `Precond(double** A, double*x, double* p)`

Spróbujmy poprawić nasz schemat biorąc lepszy preconditioner. Zauważmy, że licząc p_2 mamy już obliczone p_1 i możemy go użyć. Tak więc nie musimy pomijać elementów układu „pod diagonalą”:

$$\begin{aligned} A_{11}p_1 + A_{12}p_2 + A_{13}p_3 + \dots + A_{1n}p_n &= r_1 \\ A_{21}p_1 + A_{22}p_2 + A_{23}p_3 + \dots + A_{2n}p_n &= r_2 \\ A_{31}p_1 + A_{32}p_2 + A_{33}p_3 + \dots + A_{3n}p_n &= r_3 \\ \dots & \\ A_{n1}p_1 + A_{n2}p_2 + A_{n3}p_3 + \dots + A_{nn}p_n &= r_n \end{aligned}$$

Co daje nam prosty wzór na p :

$$p_i = \frac{1}{A_{ii}}(r_i - \sum_{j=1}^{i-1} A_{ij}p_j)$$

Gdy $\alpha = 1$ schemat taki nazywamy **Metodą Gaussa-Seidla**.

Zadanie 5 Wypróbuj nowy wzór na p , znów sprawdzając różne α .

Schematy z $\alpha > 1$ nazywamy metodami **Successive Over-Relaxation (SOR)**.

2 Dobieramy α

Widać wyraźnie, że zbieżność bardzo zależy od α i jasnym jest, że najlepiej byłoby dobierać ten współczynnik w każdej iteracji. Zauważmy że residual po iteracji wynosi:

$$\hat{r} = r - \alpha Ap$$

Spróbujmy zminimalizować kwadrat normy tego residualu:

$$\hat{r}^T \hat{r} = (r - \alpha Ap)^T (r - \alpha Ap) = r^T r - 2\alpha r^T Ap + \alpha^2 (Ap)^T Ap$$

Licząc pochodną po α mamy:

$$-r^T Ap + 2\alpha (Ap)^T Ap = 0$$

Ostatecznie:

$$\alpha = \frac{r^T Ap}{(Ap)^T Ap}$$

Schemat z takim α nazywamy metodą **MINRES**.

Zadanie 6 Oblicz wektor Ap . Zauważ, że wyrażenie $a^T b$ to iloczyn skalarny dwóch wektorów $a^T b = a \cdot b$. Napisz funkcję liczącą iloczyn skalarny `skal(double*, double*, int)` i oblicz α z powyższego wzoru. Sprawdź zbieżność przy takim α .

3 Wycinamy nadmiary

Przez q oznaczmy poprawkę z poprzedniej iteracji. Można powiedzieć, że w następnej iteracji nie chcemy „stracić” tego co „zyskał” w poprzedniej. Dlatego za nową poprawkę weźmiemy $p - \beta q$. Teraz wzór na nowy residual będzie:

$$\hat{r} = r - \alpha A(p - \beta q)$$

Zadanie 7 Wypisz wzór na $\hat{r}^T \hat{r}$ i zróżniczkuj go po β . Wylicz β przyjmując, że $r^T Aq = 0$ (to wynika z poprzedniej iteracji).

Zadanie 8 Zmodyfikuj iterację wg. schematu:

- oblicz residual
- oblicz $p = M^{-1}r$
- jeżeli to nie pierwsza iteracja: oblicz β i nową poprawkę: $p = p - \beta q$
- oblicz α
- wylicz nowe rozwiązanie $x = x + \alpha p$
- zachowaj poprawkę $q = p$ (opłaca się też zachować Ap)

4 A jeśli A jest symetryczna i dodatnio określona ...

W naszym przypadku możemy wykorzystać fakt, że macierz A jest symetryczna i dodatnio określona. Wtedy zamiast minimalizować $r^T r$ możemy minimalizować pewien specjalny funkcjonal:

$$\frac{1}{2} x^T A x - b^T x$$

Pytanie: Jakie fizyczne wyjaśnienie mają następujące rzeczy w naszym przypadku:

- Czym jest powyższy funkcjonal?
- Dlaczego A jest symetryczna?
- Dlaczego A jest dodatnio określona?

Zadanie 9 Podstaw w powyższym wzorze $x = x^{(n)} + \alpha p$, zróżniczkuj i wylicz α . Zauważ, że $\frac{1}{2} x^T A x - b^T x = \text{const} + \frac{1}{2} (\alpha p)^T A (\alpha p) - r^T (\alpha p)$.

Zadanie 10 Analogicznie jak poprzednio, podstaw $x = x^{(n)} + \alpha(p - \beta q)$, zróżniczkuj i wylicz β . (tym razem $q^T r = 0$)

Zadanie 11 Zastosuj dokładnie identyczną iterację zamieniając jedynie α i β i zbadaj zbieżność.

Schemat taki nazywamy metodą **gradientu sprzężonego** — Conjugate Gradient Method (**CG**).

Uwaga: Aktualnie zbieżność jest bardzo słaba. Wynika to z faktu, że choć A jest symetryczna to preconditioner z metody Gaussa-Seidla M^{-1} już nie jest.

Zadanie 12 Zbadaj zbieżność z preconditionerem diagonalnym, lub wyrażeniem $p = r$ (brakiem preconditionera).

Uwaga: Metodę Conjugate Gradient można zaimplementować w bardziej „zwartej” formie. Taki schemat można znaleźć na wikipedii, bądź w notatkach z wykładu.