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	Смирнова Анита Андреевна
Группа	РК6-61
Тип задания	Лабораторная работа
Тема лабораторной работы	Метод сопряженных градиентов

Студент	________________ *подпись, дата*	**Смирнова А.А.** *фамилия, и.о*
Преподаватель	________________ *подпись, дата*	**Соколов П.А.** *фамилия, и.о.*
Преподаватель	________________ *подпись, дата*	**Першин Ю.А.** *фамилия, и.о.*

Оценка ___________________________________

Москва, 2019 г.

Оглавление

Задание на лабораторную работу

Метод сопряженных градиентов

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

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

T=T(x,y) – температура в точке (x,y),

f(x, y)=1 – функция тепловых источников, описывающая в данном случае равномерный нагрев. Рассматривается пространство

$$\Omega = \{(x,y) \text{ in } [0; 1]\times[0; 1]\},$$

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. Для этого необходимо построить сетку с помощью равномерно распределенных узлов:

$$x_i = ih, \ \ i= 0,...,N,$$

$$y_i = jh, \ \ j= 0,...,N,$$

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

$$\mathbf{T} = [\, T_{0,0}, T_{1,0}, ..., \ T_{N,0}, T_{0,1}, T_{1,1}, ..., T_{N,2}, ..., T_{N-1,N}, T_{N,N} \,]$$

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

Реализовать метод сопряженных градиентов и проанализировать результаты.

Задачи, выполненные в процессе реализации лабораторной работы

1. Для формулы (1) была применена формула численного дифференцирования относительно определенной координаты. Формула численного дифференцирования второго порядка для второй производной функции f(x) в точке x_1 имеет вид:

$$f''(x_1) = \frac{f(x_1 - h) - 2f(x_1) + f(x_1 + h)}{h_1^2} + \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi) \quad (2),$$

$$\xi \in (x_1 - h;\ x_1 + h)$$

Компоненты формулы (1) можно расписать с помощью формулы (2):

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T(x - h_1, y) - 2T(x, y) + T(x + h_1, y)}{h_1^2}$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T(x, y - h_2) - 2T(x, y) + T(x, y + h_2)}{h_2^2}$$

Тогда формулу (1) можно представить в виде:

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

$$-\frac{T(x-h_1,y)-2T(x,y)+T(x+h_1,y)}{h_1^2}-\frac{T(x,y-h_2)-2T(x,y)+T(x,y+h_2)}{h_2^2}$$

(3)

Формулу (3) можно преобразовать в формулу, которую можно использовать в вычислительном эксперименте. На Рис. 1. изображено пространство, которое нужно дискретизировать с помощью формулы (3). Пусть для точка, для которой используется формула (3) − точка, у которой

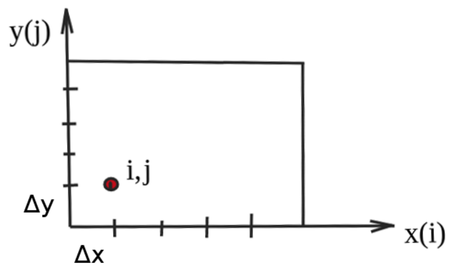

Рис. 1. Вспомогательный рисунок для вывода формулы.

Тогда можно преобразовать формулу (3) с учетом этих условий:

$$\mathrm{f}(x_i\,,\ y_i\,)=-\frac{T_{i-1,j}-2T_{i,j}+T_{i+1,j}}{h_1^2}-\frac{T_{i,j-1}-2T_{i,j}+T_{i,j+1}}{h_2^2}\quad(4)$$

По условию f(x, y) = 1:

$$-\frac{T_{i-1,j}-2T_{i,j}+T_{i+1,j}}{h_1^2}-\frac{T_{i,j-1}-2T_{i,j}+T_{i,j+1}}{h_2^2}=1\quad(5)$$

Также по условию $h_1=h_2$, поэтому введем переменную h = $h_1=h_2$:

$$-\frac{T_{i-1,j}-2T_{i,j}+T_{i+1,j}}{h^2}-\frac{T_{i,j-1}-2T_{i,j}+T_{i,j+1}}{h^2}=1\quad(6)$$

$$-\frac{T_{i-1,j}-4T_{i,j}+T_{i+1,j}+T_{i,j-1}+T_{i,j+1}}{h^2}=1\quad(7)$$

$$T_{i-1,j}-4T_{i,j}+T_{i+1,j}+T_{i,j-1}+T_{i,j+1}=-h^2\quad(8)$$

Формула (8) может использоваться для всех внутренних узлов дискретизированного пространства.

Следующий шаг – построение разрешающей СЛАУ с помощью формулы (8). Для этого необходимо построить сетку с помощью равномерно распределенных узлов:

$$x_i = \mathrm{i}h,\ \ \mathrm{i}= 0,...,N, \ (9)$$

$$y_i = \mathrm{j}h,\ \ \mathrm{j}= 0,...,N, \ (10)$$

где $h = \frac{1}{N}$ и N+ 1 является числом узлов вдоль каждой из координат.

2. Были исследованы свойства полученной матрицы. Для наглядности использую пример матрицы, для которой N = 4. Тогда матрица коэффициентов будет размерностью $(N - 1)^2$ x $(N - 1)^2 = 9$x9. Таблица 1 представляет собой матрицу коэффициентов для N = 4.

-4	**1**	0	**1**	0	0	0	0	0
1	**-4**	**1**	0	**1**	0	0	0	0
0	**1**	**-4**	0	0	**1**	0	0	0
1	0	0	**-4**	**1**	0	**1**	0	0
0	**1**	0	**1**	**-4**	**1**	0	**1**	0
0	0	**1**	0	**1**	**-4**	0	0	**1**
0	0	0	**1**	0	0	**-4**	**1**	0
0	0	0	0	**1**	0	**1**	**-4**	**1**
0	0	0	0	0	**1**	0	**1**	**-4**

Таблица 1. Матрица коэффициентов для N = 4.

- Матрица **A** называется *положительно определенной*, если она симметричная, и верным является неравенство:

  $$\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} > 0 \ \ (11)$$

  для любого вектора $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$ подходящей размерности. Легко проверить, что выражение $\mathbf{x}^T \mathbf{A}\mathbf{x} > 0$ имеет вид:

$$\mathbf{x}^{T}\mathbf{A}\mathbf{x}=\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}a_{ij}x_i\,x_j \quad (12)$$

Матрица из таблицы 1 симметричная. Для того, чтобы проверить является ли матрица положительно определенной, матрица была умножена на вектор $\mathbf{x}^{T}=[x_1, x_2, \dots x_9]$ и на вектор $\mathbf{x}$ согласно формуле (11).

$$x^TAx=$$

$$4x_1^2+4x_2^2+4x_3^2+4x_4^2+4x_5^2+4x_6^2+4x_7^2+4x_8^2+4x_9^2-2x_1x_2-2x_1x_4$$
$$-2x_3x_2-2x_5x_2-2x_6x_3-2x_5x_4-2x_5x_6-2x_8x_5-2x_9x_6-2x_4x_7-2x_7x_8-2x_8x_9=$$
$$2x_1^2+(x_1-x_2)^2+(x_1-x_4)^2+x_2^2+(x_2-x_3)^2+(x_2-x_5)^2+2x_3^2+(x_3-x_6)^2$$
$$x_4^2+(x_4-x_5)^2+(x_4-x_7)^2+(x_5-x_6)^2+(x_5-x_8)^2+x_6^2+(x_6-x_9)^2+$$
$$2x_7^2+(x_7-x_8)^2+x_8^2+(x_8-x_9)^2+2x_9^2\geq 0$$

Из упрощенного выражения следует, что выражение всегда положительно. То есть выполняются два условия из определения, следовательно матрица является положительно определенной.

- Квадратная матрица $\mathbf{A} \in R^{N\times N}$ называется ленточной, если существуют такие p, q ∈ Z, где 1< p, q < N, что j − i ≥ p ⇒ a_{ij} = 0 и i − j ≥ q ⇒ a_{ij} = 0. Матрица из таблицы 1 является ленточной по определению. Пусть центральная диагональ обозначается как диагональ 0, диагональ сверху обозначается как 1, снизу -1. Тогда две самых дальних диагонали от центральной имеют номера -(N - 2) и (N - 2), то есть p(N) = w(N) = N - 2. Тогда ширина ленты w(N) = 2(N - 2) + 1 = 5.
- Матрица A обладает свойством диагонального преобладания, если

$$|a_{ii}| \geq \sum_{j=1,\, i\neq j}^{N}|a_{ij}|,\ i = 1,....N \quad (13)$$

Матрица из таблицы 1 соответствует условию (13), т.е. обладает свойством диагонального преобладания, причем, так как выполняется нестрогое неравенство, то матрица обладает свойством нестрогого диагонального преобладания.

3. Так как матрица является симметричной и положительно определенной, к ней применим метод сопряженных градиентов.

4. Была написана 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 строго меньше eps и матрицей предобуславливания C_inv, которая по умолчанию равна единичной матрице.

- Реализация решения в коде была произведена с помощью метода сопряженных градиентов.
- В решениии использовалась *матрица предобуславливания* - матрица, используемая для модификации исходной матрицы. Матрица предобуславливания использовалась по причине того что, когда матрица A является плохо обусловленной (т.е. имеет большое число обусловленности K(A)), вычислительная погрешность, становится достаточно большой и значимой. Более того, плохо обусловленные матрицы обладают медленной сходимостью. Выходом из этой ситуации является модификация исходной матрицы A так, что полученная в результате матрица обладает значительно меньшим числом обусловленности. Для положительно определенной матрицы использовалась формула:

$$\tilde{A} = C^{-1} A \ (C^{-1})^T \quad (14)$$

где обозначение C^{-1} говорит о том, что матрица предобуславливания C^{-1} должна быть невырожденной. При подобном предобуславливании полученная матрица $\tilde{A}$ сохраняет свойство положительной определенности.

- Метод сопряженных градиентов можно резюмировать в виде следующих рекурсивных уравнений:

$$t_k = \frac{\langle r^{(k-1)}, r^{(k-1)}\rangle}{\langle \boldsymbol{\upsilon}^{(k)}, A\boldsymbol{\upsilon}^{(k)}\rangle} \quad (15)$$

$$x^{(k)} = x^{(k-1)} + t_k \boldsymbol{\upsilon}^{(k)} \ (16)$$

$$r^{(k)} = r^{(k-1)} + t_k A\boldsymbol{\upsilon}^{(k)} \ (17)$$

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

$$\boldsymbol{\upsilon}^{(k+1)} = r^{(k)} + s_k\, \boldsymbol{\upsilon}^{(k)}, \ (19)$$

  где $x^{(0)}$, $r^{(0)} = b - Ax^{(0)}$ и $\boldsymbol{\upsilon}^{(1)} = r^{(0)}$ являются начальными условиями.

5. Было найдено 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}:

- Получившиеся размерности матриц коэффициентов:

  При N = 9 размерность равна 64 x 64.

  При N = 17 размерность равна 256 x 256.

- Было оценено сколько требуется памяти для хранения этих матриц в памяти компьютера. Было использовано предположение, что каждый элемент матрицы представляется в виде числа с двойной точностью. Компьютерный формат представления числа с плавающей запятой занимает в памяти 64 бита, или 8 байт.

  То есть для хранения матрицы при N = 9 в памяти компьютера потребуется 64 x 64 x 8 = 32.768 Байт, а N = 17, 256 x 256 x 8 = 524.288 Байт.

- Для N = 9, N = 17 были выведены на экран линии уровня решения. Полученные графики изображены на рис. 1, рис. 2.

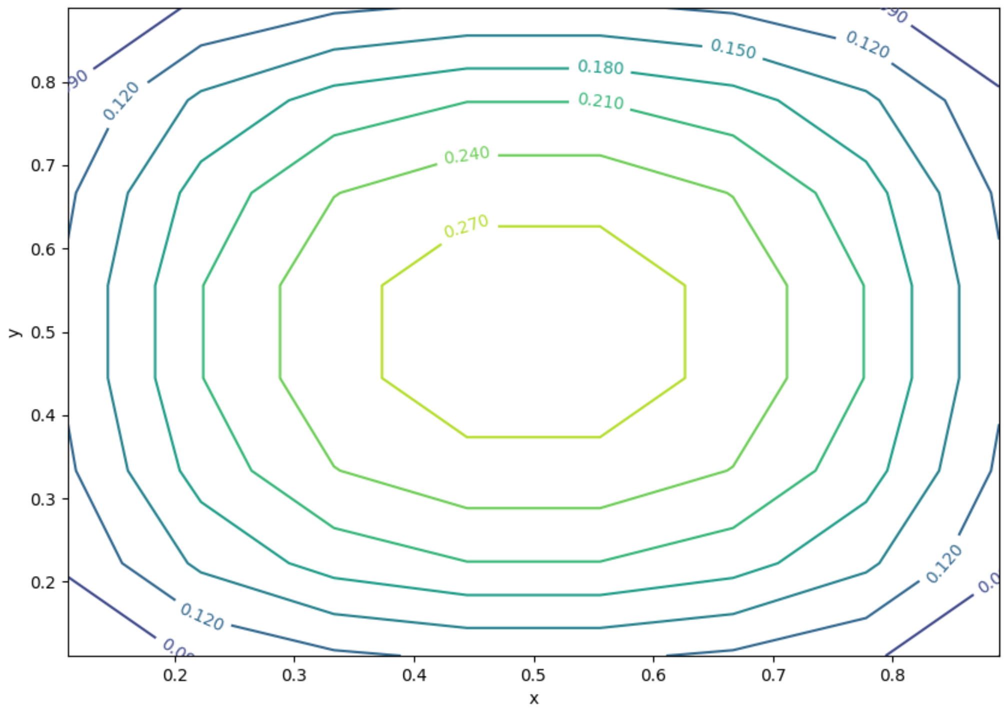

Рис. 2. Линии уровня решения для N = 9.

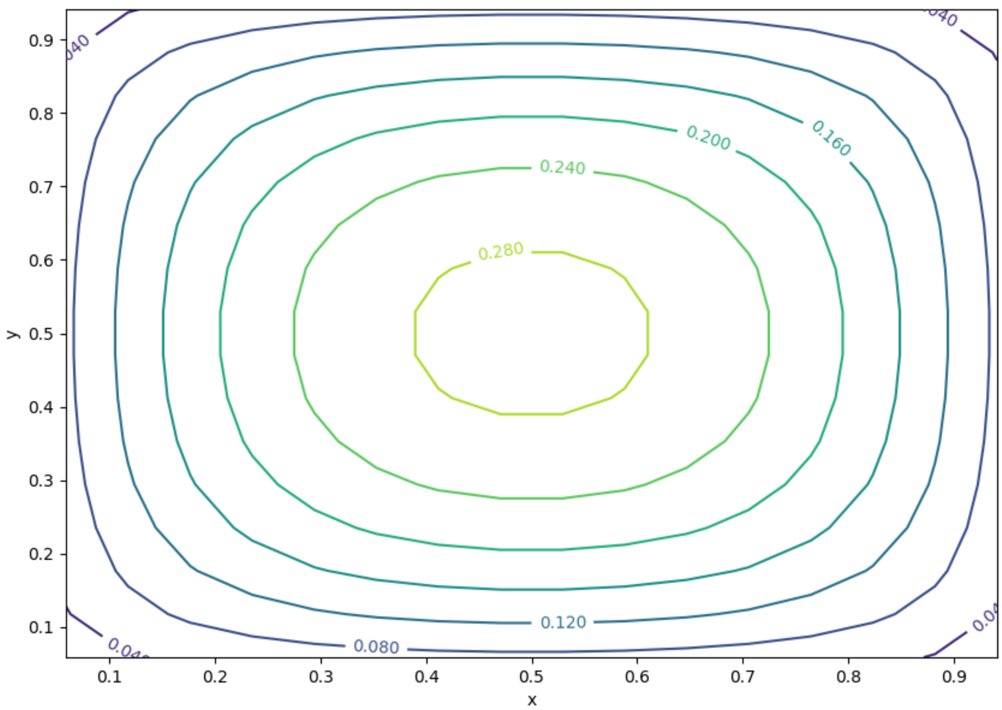

Рис. 3. Линии уровня решения для N = 17.

- По полученным результатам можно сделать вывод, что максимальная температура при равномерном нагреве находится в центре пластины.

6. Для N = 17 был построен график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов. Для этого была модифицирована функция conjugate_gradient так, чтобы она дополнительно возвращала массив значений среднеквадратичных норм вектора невязки и количество итераций. Получившийся график изображен на рис. 4.

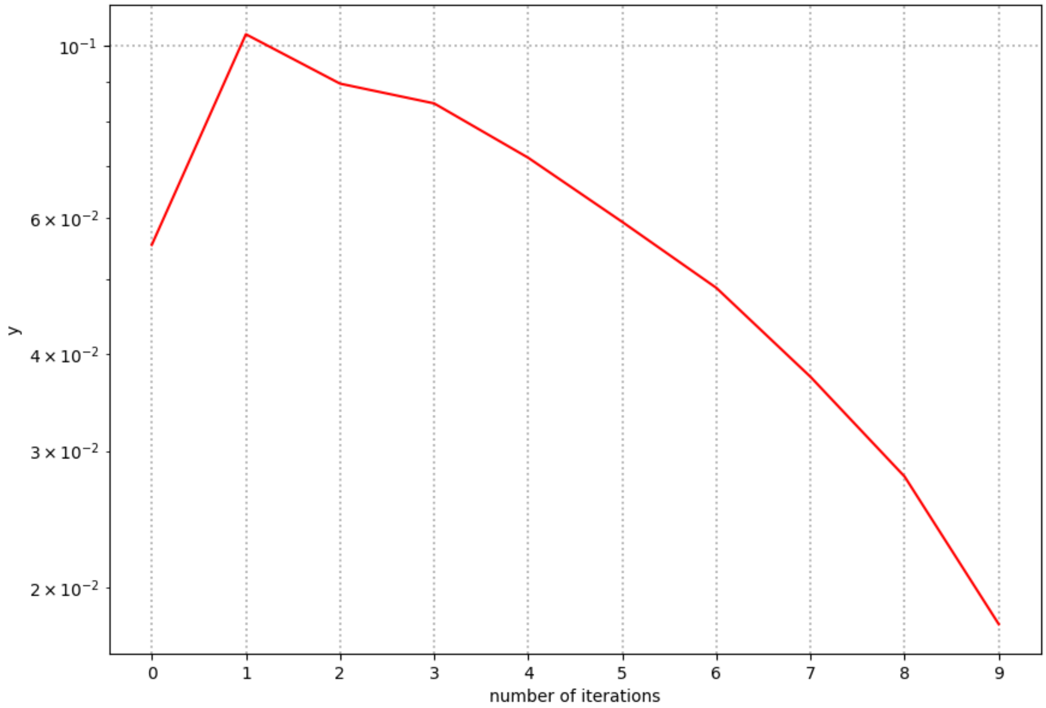

Рис. 4. Зависимость среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов для N = 17.

7. Одним из вариантов матриц C^{-1} в формуле (14) является следующее предобуславливание:

$$\tilde{A} = D^{-1/2} A \ (D^{-1/2})^T, (20)$$

где $D^{-1/2}$ состоит из корней от обратных диагональных элементов матрицы A. Метод сопряженных градиентов, сформулированный для модифицированной матрицы, называется *методом сопряженных градиентов с предобуславливанием*.

Было найдено решение СЛАУ при N = 17, среднеквадратичной норме вектора невязки строго меньше 10^{-4} и матрице предобуславливания $D^{-1/2}$.

8. Для полученного решения был построен график зависимости среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов. График изображен на рис. 5.

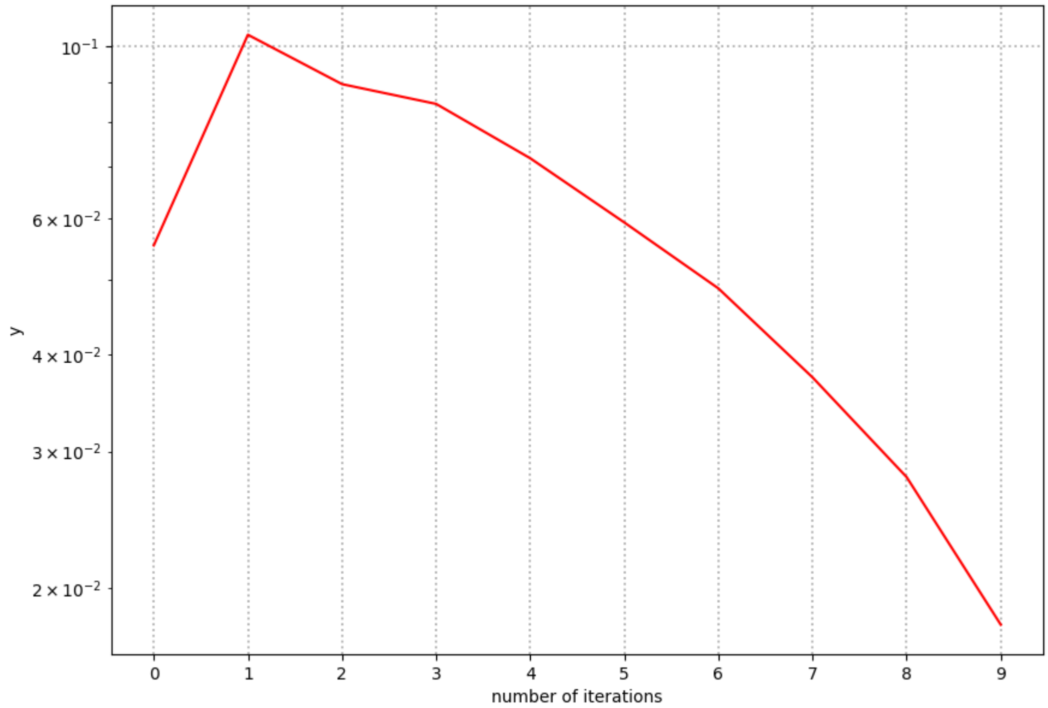

Рис. 5. Зависимость среднеквадратичной нормы вектора невязки от номера итерации метода сопряженных градиентов с предобуславливанием для N = 17.

График 5 совпадает с графиком 4, построенным в случае отсутствия предобуславливания. Это можно связать с тем, что число обусловленностей для матрицы $\tilde{A}$, рассчитанной по формулам (14), (20), одинаково. Число обусловленностей для матрицы $\tilde{A}$ определяется как норма матрицы $\tilde{A}$, умноженная на норму обратной матрицы $\tilde{A}$. Норма в каждом случае была подсчитана с помощью библиотечной функции np.linalg.cond(). В каждом случае число обусловленностей равно приблизительно 116.5.

Заключение

- При решении стационарной задачи теплопроводности с помощью метода сопряженных градиентов использование количества узлов N = 9 и N = 17 приводит к одинаково точному решению. Для визуализации лучше использовать решение при N = 17, т.к. он строится по большему количеству точек. Для визуализации при N = 9 требуется использование интерполяции.
- При решении Ax=b стоит обратить внимание на число обусловленностей матрицы A. В случае, когда матрица A имеет большое число обусловленности K(A), вычислительная погрешность становится достаточно значимой. На практике было выяснено, что не в любом случае использование матрицы предобуславливания приводит к минимизации вектора невязки.

Список использованных источников

1. Першин А.Ю., Соколов А.П., Вычислительная математика, Лабораторные работ. Учебное пособие. Москва, 2018.
2. Першин А.Ю. Лекции по вычислительной математике. Москва, 2019, 143 с.