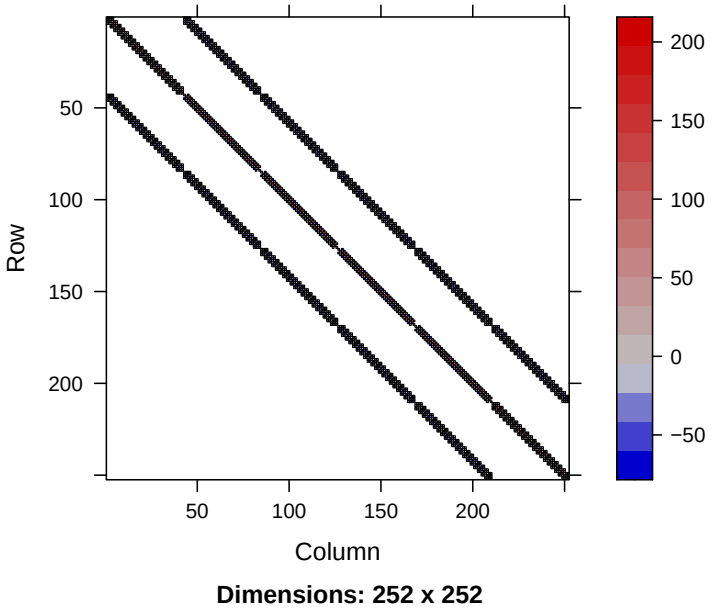
Metody Numeryczne - Skrypt 2

Wczytajmy pierw macierz sztywności z pliku:

```
S = as.matrix(read.table("data/metnum/S.txt"))
S = Matrix(S,sparse=TRUE)
```

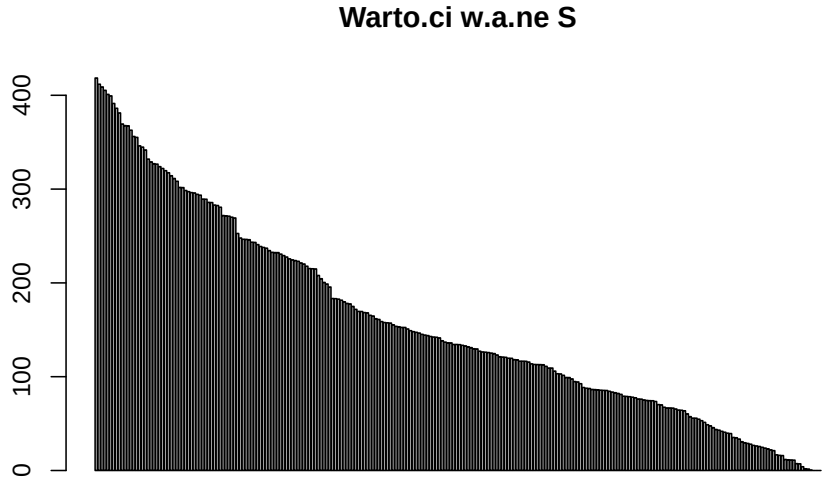
Możemy sobie teraz wyświetlić gdzie ma ona niezerowe elementy:

```
image(S)
```



Możemy teraz zobaczyć jej wartości własne

```
lam = eigen(S)$val
barplot(lam,main="Wartości właśne S")
```



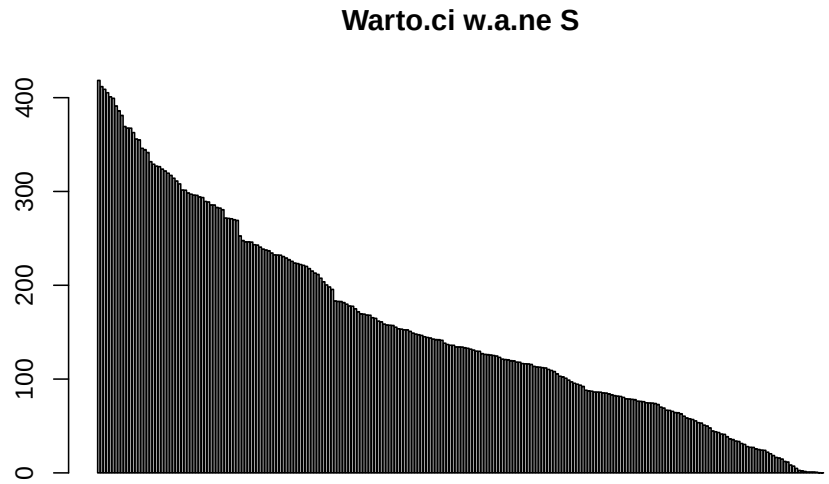
Jako, że macierz jest symetryczna wszystkie wartości własne są rzeczywiste. Warto zauważyć, że trzy ostatnie wartości własne są praktycznie równe zero:

```
print.few(lam)
```

λ_1	λ_2	$\cdots$	λ_{248}	λ_{249}	λ_{250}	λ_{251}	λ_{252}
418.4178	411.8008	$\cdots$	1.554674	0.3134155	0	0	0

Jest to związane z wolnymi stopniami swobody naszego układu. Możemy pozbyć się tych stopni zastępując odpowiednie wiersze wierszami macierzy jednostkowej

```
fix = c(1,2,42)    # Wybrane wiersze
I = diag(nrow(S)) # Macierz jednostkowa o odpowiednim rozmiarze
S[fix,]=I[fix,]    # Zastępujemy wiersze
S[,fix]=I[,fix]    # Zastępujemy kolumny (by macierz pozostała symetryczn
lam = eigen(S)$val
barplot(lam,main="Wartości właśne S")
```



Teraz ostatnie wartości są już niezerowe

```
print.few(lam)
```

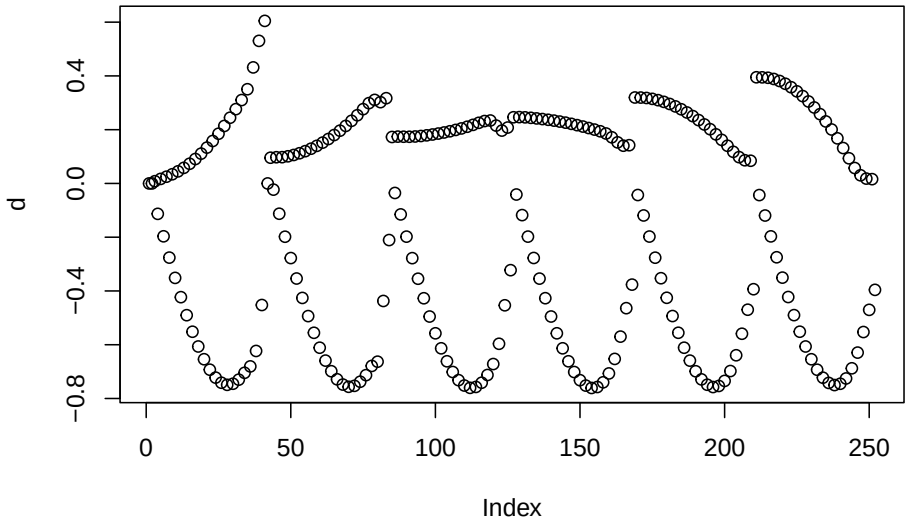
λ_1	λ_2	$\cdots$	λ_{248}	λ_{249}	λ_{250}	λ_{251}	λ_{252}
418.4139	411.7858	$\cdots$	1	1	0.7062446	0.208298	0.0559314

Rozważmy teraz przyłożenie siły w 80-tym stopniu swobody. Wektor sił F będzie miał zera wszędzie poza 80-tym elementem.

```
i=80
F = rep(0,nrow(S))
F[i] = -10
```

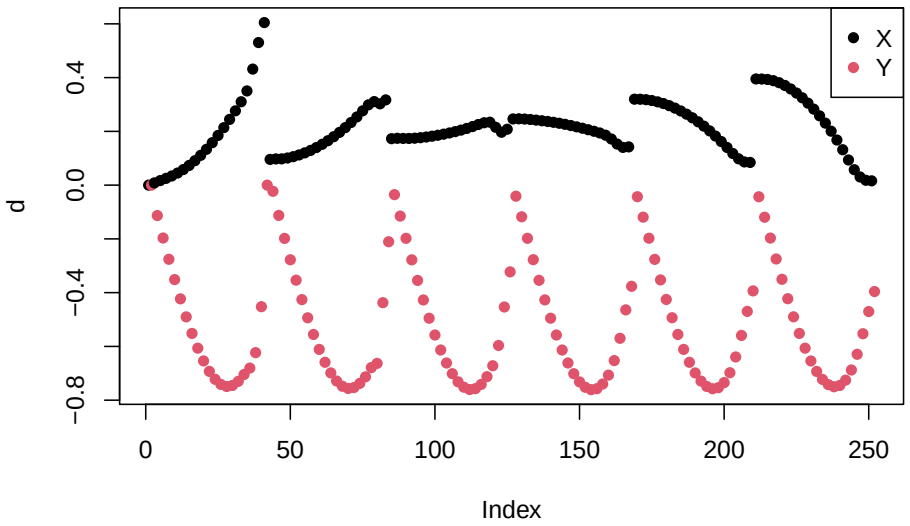
Odkształcenie spowodowane taką siłą to $d = S^{-1}F$.

```
d = solve(S,F) # funkcja solve rozwiązuje S d = F
plot(d)
```



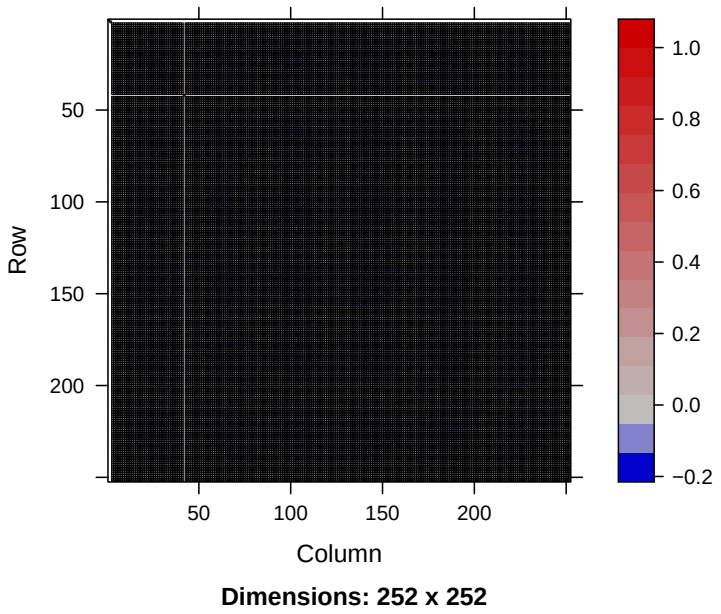
Odkształcenie to w tej formie trudno zinterpretować. Po pierwsze co drugi element oznacza odkształcenie w X a co drugi w Y:

```
plot(d,col=1:2,pch=16)
legend("topright",c("X","Y"),col=1:2,pch=16)
```



Tutaj warto zauważyć, że choć macierz S jest rzadka (ma mało niezerowych elementów) tak macierz S^{-1} będzie pełna:

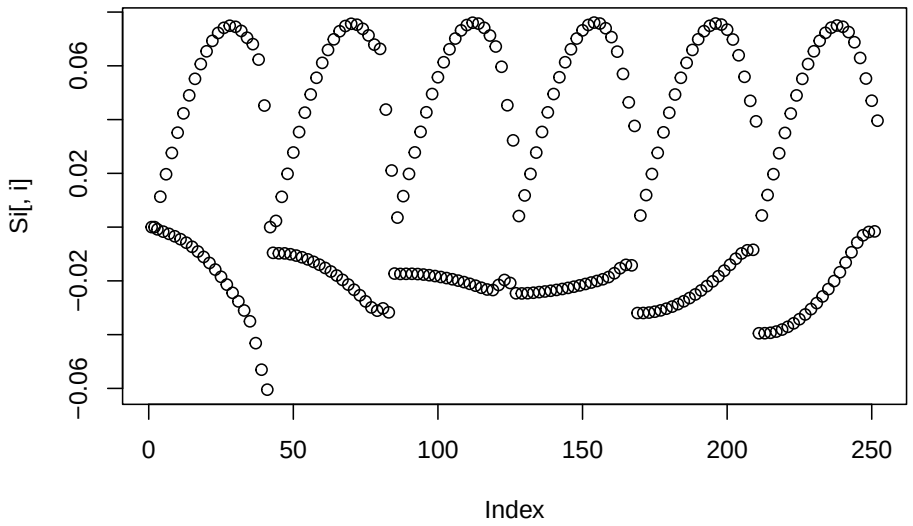
```
Si = solve(S) # funkcja solve zwraca też macierz odwrotną
image(Si)
```

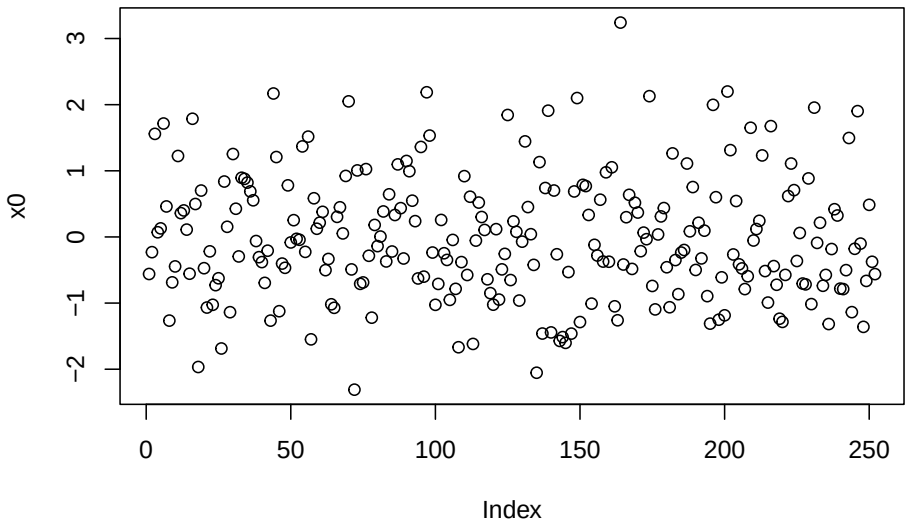


Można to sobie wyobrazić w następujący sposób. k-ta kolumna macierzy odwrotnej S^{-1} jest równa $S^{-1}v$, gdzie v to wektor samych zer z jedynką na k-tym miejscu. Można więc powiedzieć, że k-ta kolumna macierzy S^{-1} to odkształcenie belki przy przyłożeniu jednoskowej siły w k-tym stopniu swobody. Jak wiemy, niezależnie w którym stopniu swobody przyłożymy siłę, odkształcenia będą występowały we wszystkich stopniach swobody. Oznacza to, że wszystkie kolumny macierzy S^{-1} będą pełne niezerowych elementów.

Zobaczmy 80-tą kolumnę:

```
plot(Si[,i])
```





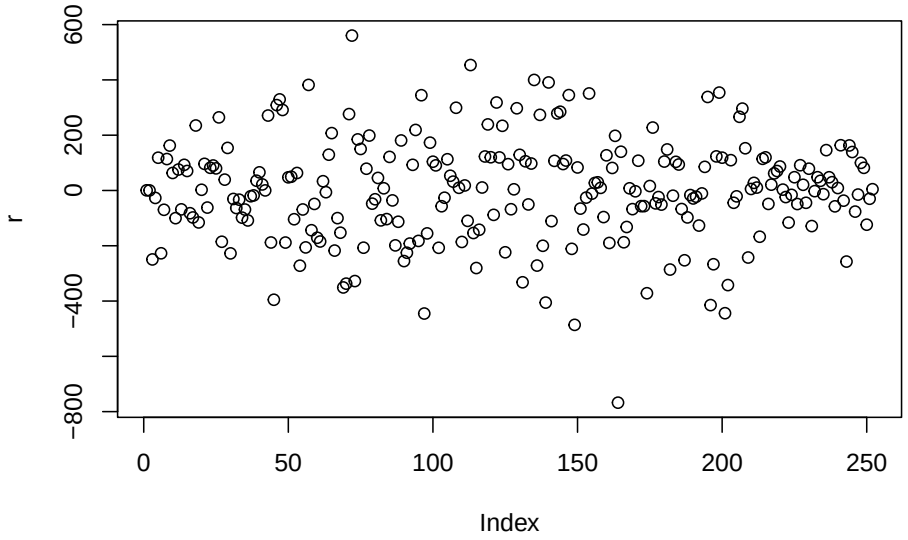
Koszt policzenia S^{-1} jest bardzo wysoki. Nawet przechowanie takiej macierzy może być niemożliwe. Dlatego w większości zagadnień numerycznych nigdy nie liczona jest bezpośrednio odwrotność macierzy, lecz rozwiązywany jest zadany układ $Sx = F$. W naszym wypadku prawa strona to wektor sił F, zaś niewiadoma x to odkształcenie. Rozwiązać taki układ można na wiele sposobów. Dla dużych układów liniowych i nieliniowych wykożytujemy metody iteracyjne. Mają one na celu nie roziwiązanie problemu w ogólności (znalezienie S^{-1}) lecz w jak najmniejszej ilości iteracji znalezienie najlepszego przybliżenia rozwiązania x. Lecz jak można sprawdzić czy rozwiązanie jest bliskie dokładnego, jeśli dokładne nie jest znane?

Weźmy dowolny wektor:

```
x0 = rnorm(ncol(S))
plot(x0)
```

Jedyne co możemy stwierdzić to jak daleko jesteśmy od spełnienia naszego układu, odejmując lewą od prawej strony równania:

```
x = x0
r = F - S %*% x
plot(r)
```



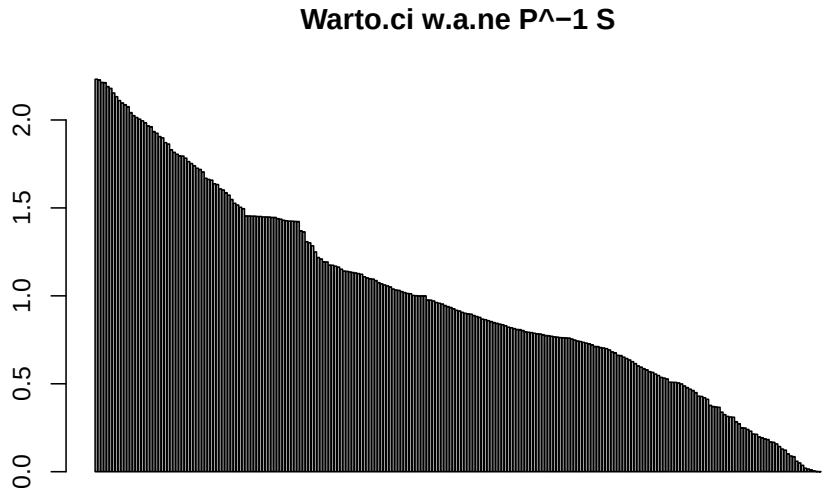
Taki wektor nazywamy residualem. Zazwyczaj by go zmierzyć jedną liczbą mówimy że residual to $\|r\|_2 = \sqrt{\sum_i r_i^2}$. Aktualnie wynosi on 2909.149542.

Zauważmy, że residual mówi nam jak daleko jesteśmy od rozwiązania, ale nie mówi nam praktycznie w jakim kierunku mamy iść. Jesteśmy w x, chcemy być $S^{-1}F$, lecz jedyne co wiemy to nie kierunek $S^{-1}F - x$, lecz $F - Sx$. Żeby wiedzieć gdzie należy iść, musimy mieć jakiekolwiek przybliżenie S^{-1}. Takie przybliżenie nazywamy preconditionerem. Zwyczajowo piszemy, że construujemy $P \simeq S$, tak by $P^{-1} \simeq S^{-1}$ - lecz w rzeczywistości należy myśleć o preconditionerze jako o operatorze P^{-1}, ponieważ wewnątrz programu, tylko on jest realizowany. Najprostrzym przykładem preconditionera jest odwrotność przekątnej macierzy (preconditioner Jacobiego):

```
P = S
P[row(P) != col(P)] = 0
```

Nie ma dobrej metody stwierdzenia, że dana macierz będzie dobrym preconditionerem dla innej, poza zbadaniem właściwości $P^{-1}S$. Chcielibyśmy by macierz ta była możliwie bliska macierzy jednostkowej. W dużych zagadnieniach oczywiście takiej możliwości zbadania nie mamy, lecz w naszym przykładzie możemy przyjżeć się tej macierzy.

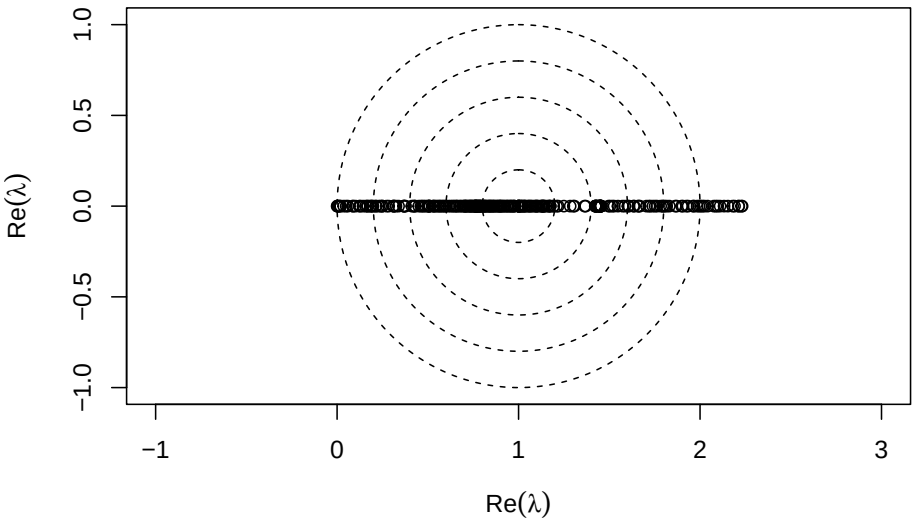
```
lam = eigen(solve(P,S))$val
barplot(lam,main="Wartości właśne P^-1 S")
```



Widzimy, że w porównaniu z S macierz ta ma wartości zgromadzone w około 1.

Patrząc w dziedzinie zespolonej, zależy nam by λ były wszystkie jak najbardziej zgromadzone blisko 1:

```
plot.lam(lam)
```

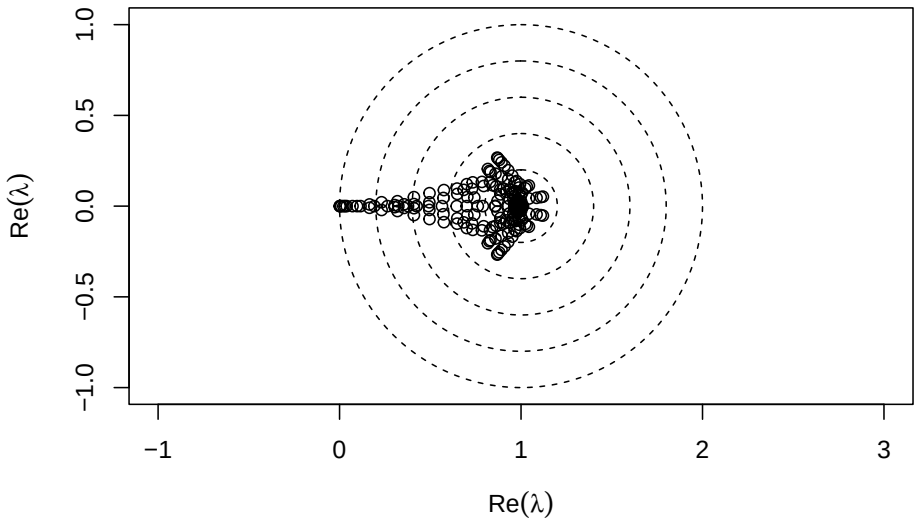


Podobnie prostym preconditionerem jest wzięcie za P dolnej trójkątnej części S (preconditioner Gaussa-Seidla):

```
P = S
P[row(P) > col(P)] = 0
```

Taka macierz jest też bardzo łatwa do odwrócenia. Daje ona bardzo przyzwoity rozkład wartości własnych:

```
lam = eigen(solve(P,S))$val
plot.lam(lam)
```

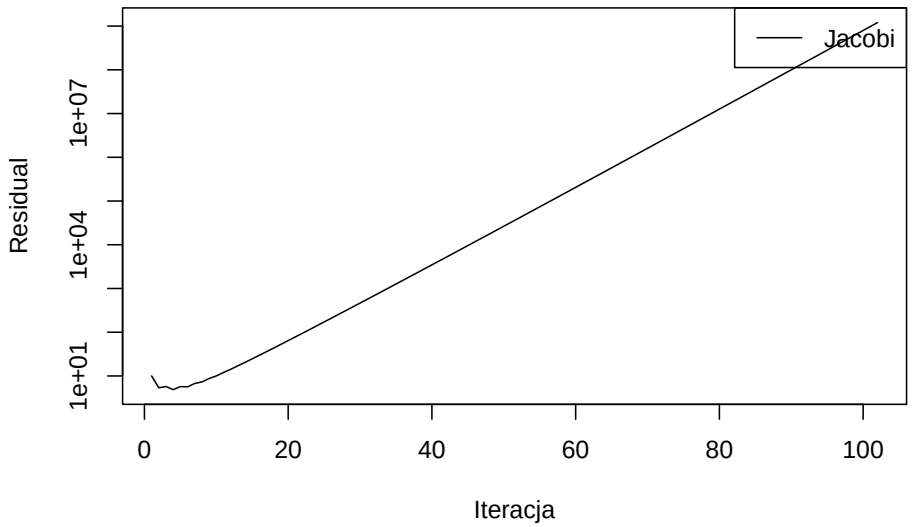
Widzimy natychmiast, że wartości te nie są już czysto rzeczywiste - ponieważ P nie jest teraz symmetryczna.

Weźmy więc nasz najprostrzy preconditioner

```
P = S
P[row(P) != col(P)] = 0
```

I w każdej iteracji przesuńmy się o: $P^{-1}r \simeq S^{-1}r = S^{-1}(F - Sx) = S^{-1}F - x$. To powinno nas doprowadzić do rozwiązania:

```
x = x0
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  x = x + p
  if (residual(i,r,"Jacobi")) break
}
draw.residuals()
```

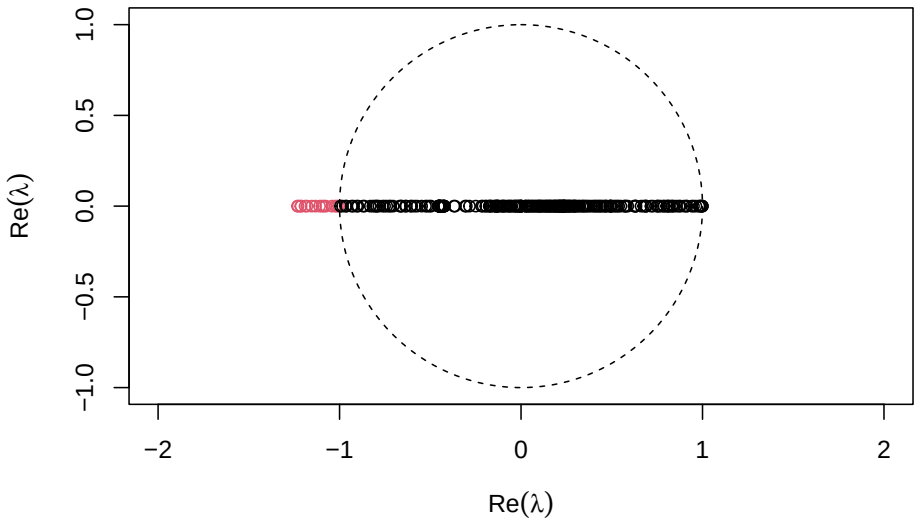


Widzimy natychmiast, że residual zamiast spadać rozbiega się wykładniczo. Jeśli spojżymy na naszą procedurę, to odmnarza ona nieustannie x przez $(I - P^{-1}S)$ ponieważ:

$$x = x + p = x + P^{-1}r = x + P^1(F - Sx) = (I - P^{-1}S)x + P^{-1}F$$

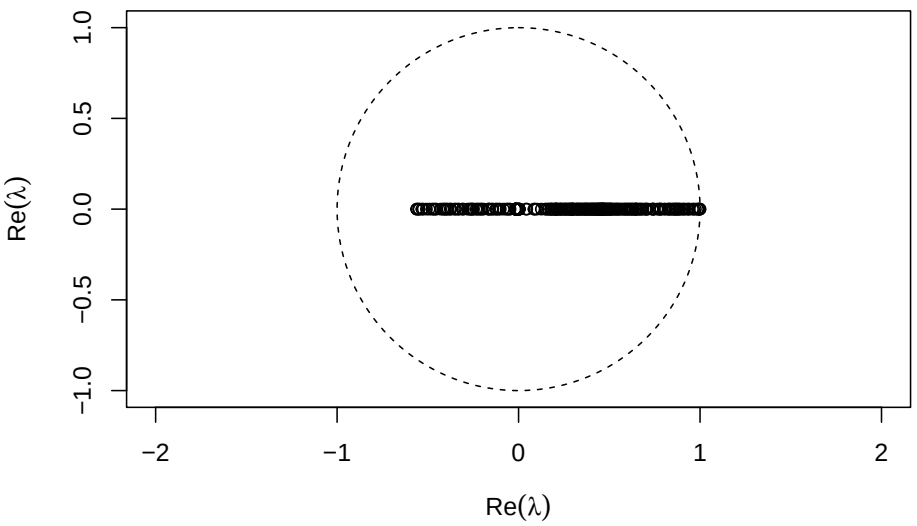
Oznacza to, że wartości własne $(I - P^{-1}S)$ poza jednostkowym okręgiem będą powodować rozbierzność.

```
lam = eigen(I - solve(P,S))$val
plot.lam(lam)
```



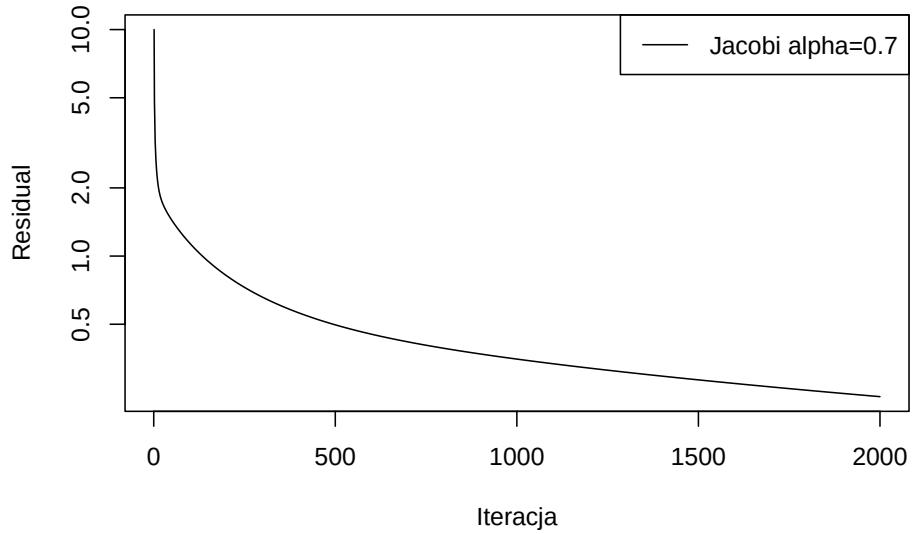
By uniknąć takiej sytuacji możemy wprowadzić współczynnik relaksacji $\alpha < 1$, który zeskaluje wartości własne by mieściły się w stabilnym okręgu:

```
alpha = 0.7
lam = eigen(I - alpha*solve(P,S))$val
plot.lam(lam)
```



Metoda z tak dobranym współczynnikiem jest już zbierzna:

```
delete.residuals("Jacobi")
alpha = 0.7
x = x0
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  x = x + alpha*p
  if (residual(i,r,"Jacobi alpha=0.7")) break
}
draw.residuals()
```

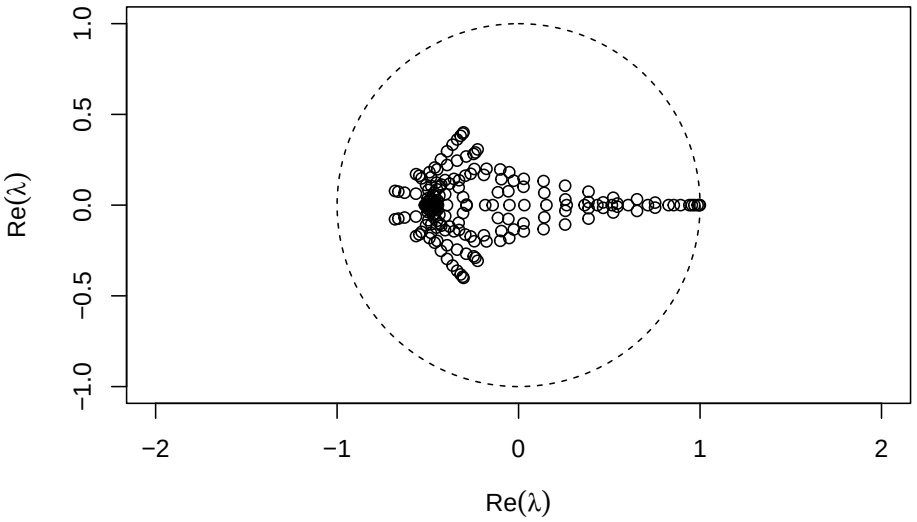


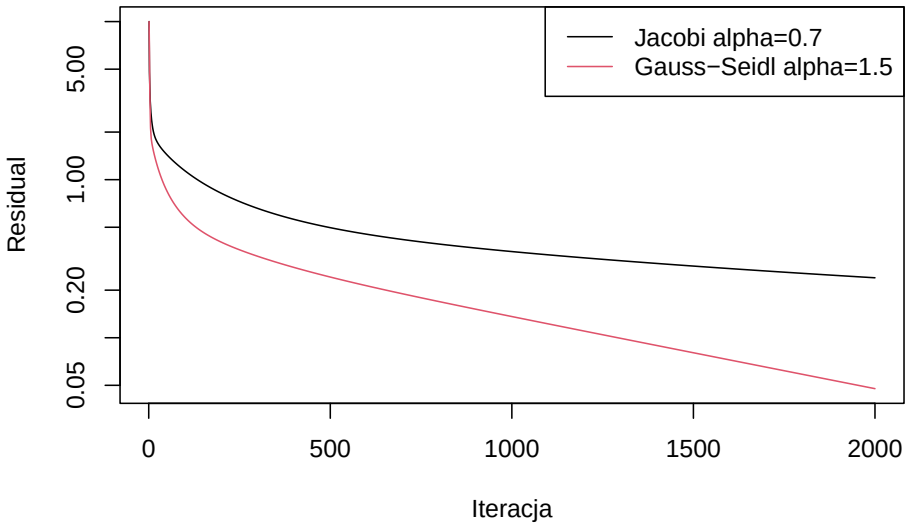
Weźmy teraz znów jako preconditioner macierz górno-trójkątną.

```
P = S
P[row(P) < col(P)] = 0
```

Warto zauważyć, że dla preconditionera Gaussa-Seidla, można dobrać współczynnik α nawet większy od jedynki (nadrelaksacja):

```
alpha = 1.5
lam = eigen(I - alpha*solve(P,S))$val
plot.lam(lam)
```






```
alpha = 1.5
x = x0
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  x = x + alpha*p
  if (residual(i,r,"Gauss-Seidl alpha=1.5")) break
}
draw.residuals()
```

Łatwo zauważyć że dobór jednej wartości α na wszystkie iteracje jest nieoptymalny. W każdym kroku należałoby dobierać α oddzielnie. Jeśli weźmiemy sume kwadratów residuali: $f(\alpha) = \sum_i r_i^2 = r^T r$, to możemy dobrać tak α by f było minimalne **po iteracji**. Residual po iteracji $r^{(n+1)}$ jest równy:

$$r^{(n+1)} = F - Sx^{(n+1)} = F - Sx^n - \alpha Sp = r^{(n)} - \alpha Sp$$

Różniczkując f po αi przyrównując pochodną do zera dostajmey:

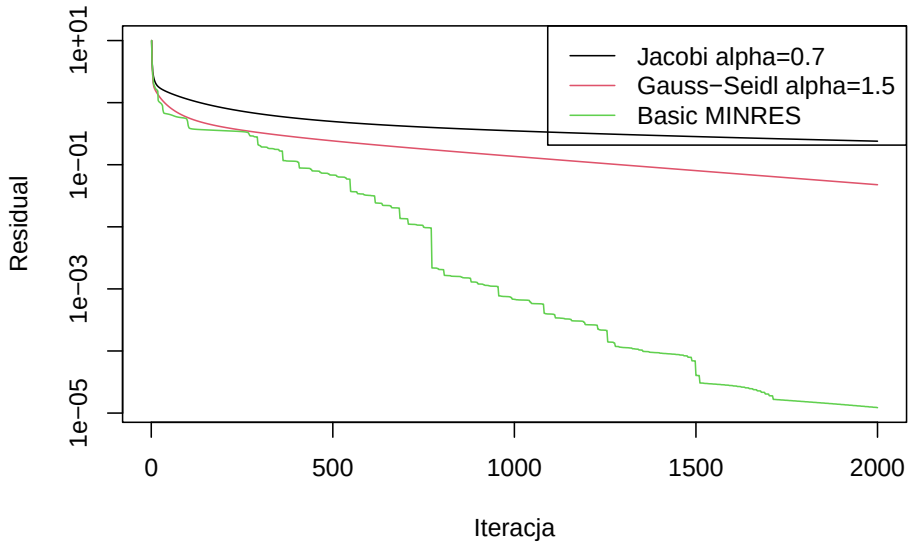
$$\alpha = \frac{r^T(Sp)}{(Sp)^T(Sp)}$$

Zobaczmy taką metodę dla preconditionera diagonalnego:

```
P = S
P[row(P) != col(P)] = 0
```

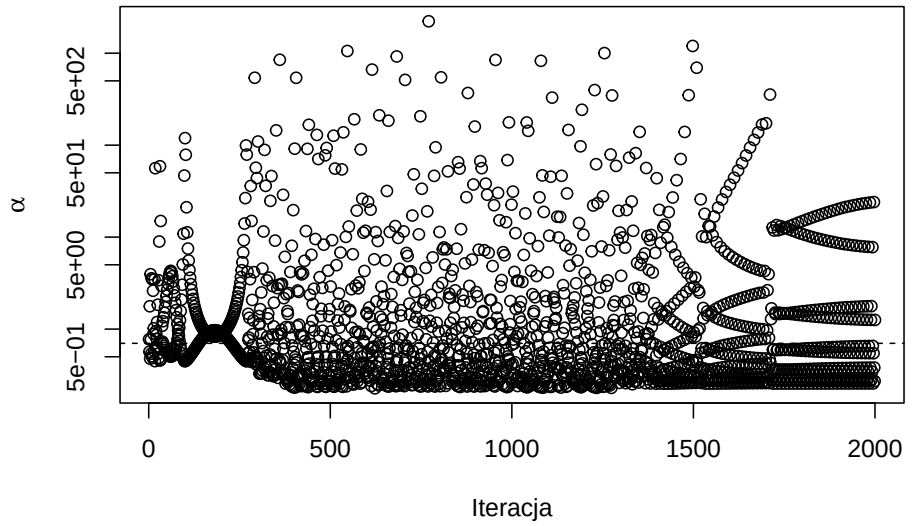
By lepiej zobaczyć co się dzieję zapiszemy wszystkie kolejne α w wektorze, by później je zwizualizować.

```
x = x0
alphas = NULL
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  Ap = S %*% p
  alpha = sum(r * Ap)/sum(Ap * Ap)
  x = x + alpha*p
  alphas = c(alphas,alpha)
  if (residual(i,r,"Basic MINRES")) break
}
draw.residuals()
```



Jak widać w przy takim optymalnym doborze α residual monotonicznie spada. Możemy teraz zobaczyć jakie wartości przyjmował ten współczynnik w trakcie procesu zbierzności:

```
plot(alphas,log="y",ylab=expression(alpha),xlab="Iteracja")
abline(h=0.7,lty=2)
```

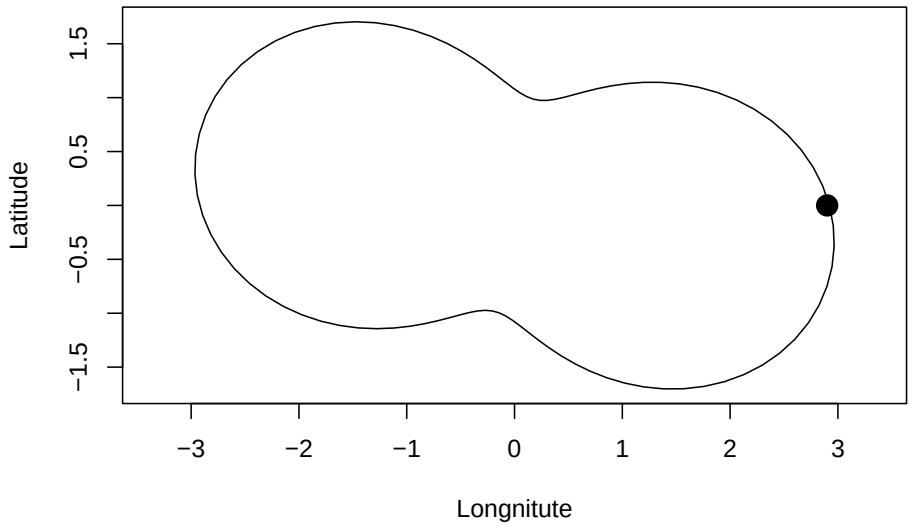


Jak widać Wykraczają one wielokrotnie poza zakres stabinych współczynników podrelaksacji dla metody Jacobiego. Oznacza to że w danej iteracji współczynnik α nie jest ograniczony przez najbardziej odstające wartości własne $P^{-1}S$.

Dość niejednorodne zachowanie metody MINRES wynika z częstej sytuacji w której to co zyskaliśmy w jednym kroku "tracimy" w następnym. Metoda monotonicznie redukuje residual, więc w rzeczywistości nie "tracimy" w kolejnej iteracji, co raczej "nie uzyskujemy tyle ile byśmy mogli". Można sobie to wyobrazić w następujący sposób. Załużmy że chcemy dotrzeć do portu na jeziorze, lecz z powodu wiatru możemy wykonywać tylko ruchy po skosie. Jeśli będziemy płynąć zawsze w danym kierunku, aż będziemy najbliżej portu (minimalne residuum) i dopiero wtedy wykonywać zwrot, w następnym ruchu musimy znów dużo przepłynąć.

Weźmy więc jezioro i port (b) na nim.

```
b = c(2.9,0)
draw.lake(b)
```

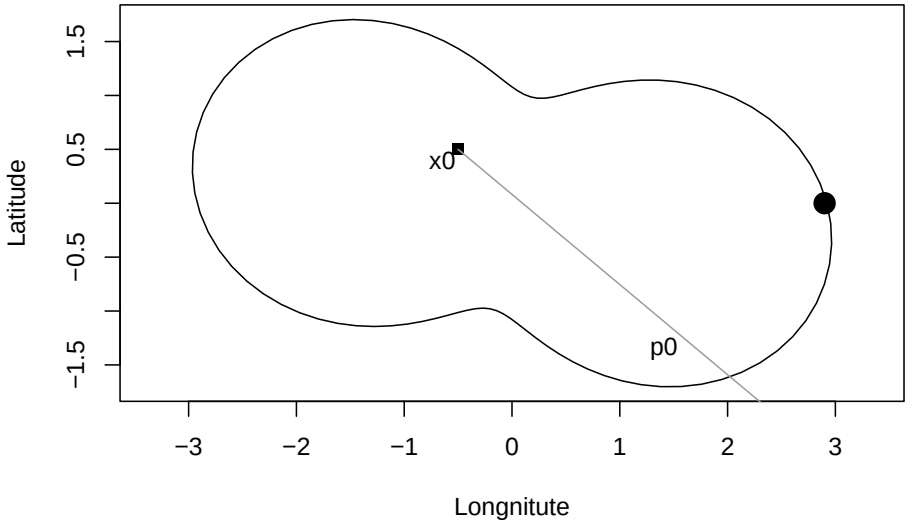


Do tego weźmy macierz A która będzie realizować zwykłą odległość euklidesową i preconditioner który będzie dawał nam skośne kierunki ruchu:

```
A = diag(2)
P = matrix(c(1,0.8,0.9,1),2,2)*4
```

Dla zadanego punktu początkowego x_0 możemy policzyć residual i kierunek p:

```
x = c(-0.5,0.5)
r = b - A %*% x
p = solve(P,r)
draw.lake(b)
draw.boat(x,p)
```

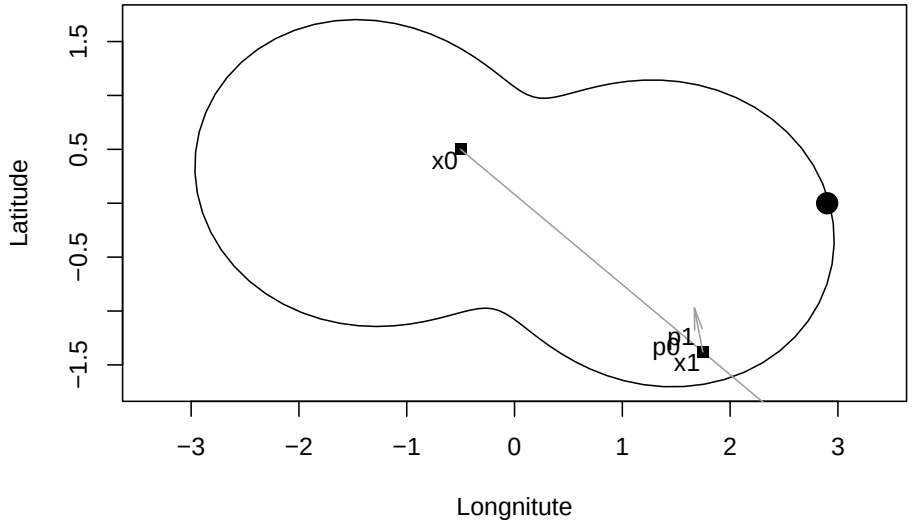


Dla takiego układu optymalna α to krok dla którego punkt x_1 będzie najbliżej portu. Można ją policzyć za pomocą tego samego wzoru:

```
  Ap = A %*% p
  alpha = sum(r * Ap)/sum(Ap * Ap)
```

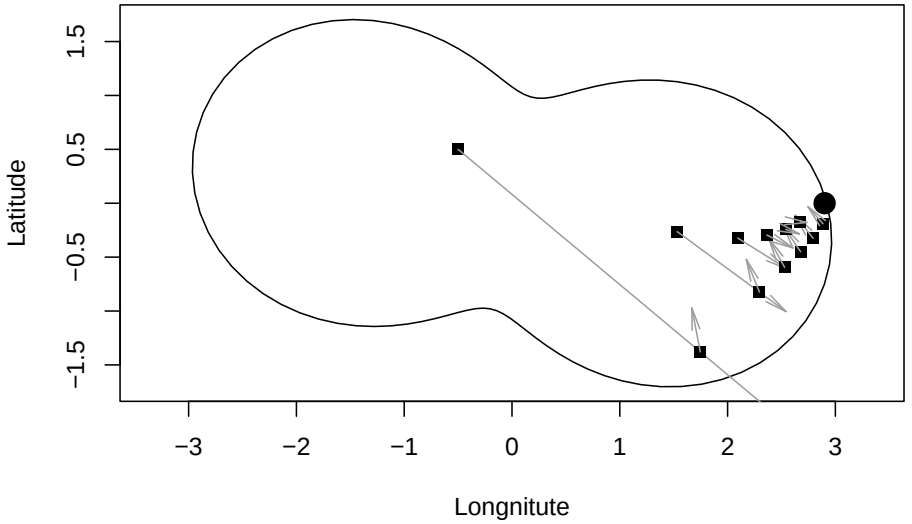
Wynosi ona 0.6535693, więc łódka powędruje nie cały wektor p lecz jego kawałek.

```
draw.lake(b)
draw.boat(x,p)
x = x + alpha * p
r = b - A %*% x
p = solve(P,r)
draw.boat(x,p,1)
```



Jednak α w nowym kierunku jest wysoka (2.7389444) i punkt x znów przesunie się daleko po skosie.

```
draw.lake(b)
x = c(-0.5,0.5)
for (i in 1:12) {
  r = b - A %*% x
  p = solve(P,r)
  draw.boat(x,p,NA)
  Ap = A %*% p
  alpha = sum(r * Ap)/sum(Ap * Ap)
  x = x + alpha*p
}
```

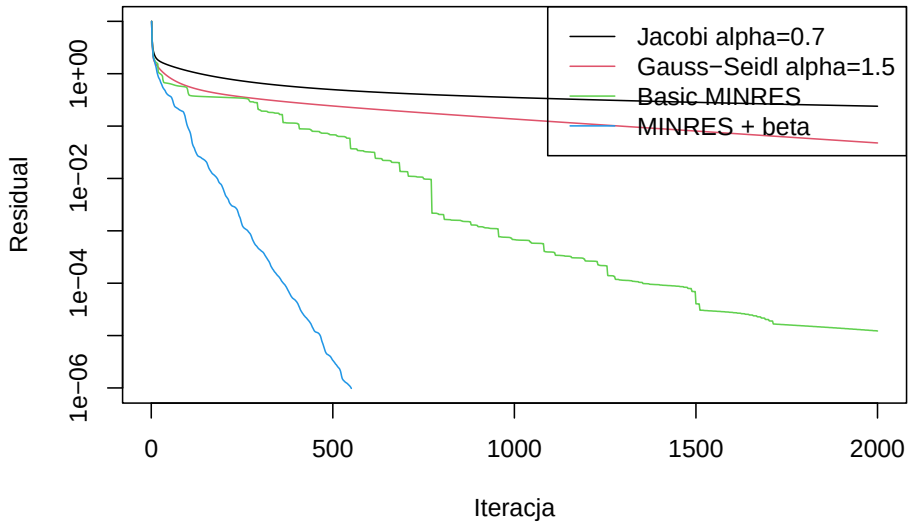


By polepszyć zbierzność, możemy zachować poprzedni kierunek p i użyć go do poprawienia następnej iteracji. Załużmy, że preconditioner wskazuje nam pewien kierunek $p = P^{-1}r$, zaś w poprzedniej iteracji poruszyliśmy się w kierunku q. Możemy usunąć część p która już w poprzedniej iteracji uzyskaliśmy modyfikując kierunek p za pomocą $p' = p - \beta q$. Stosując analogiczne rozumowanie jak porzednio otrzymamy $\beta = \frac{(Sq)^T(Sp)}{(Sq)^T(Sq)}$, a dokładniej:

$$\beta = \left[(Sq)^T(Sq)\right]^{-1}\left[(Sq)^T(Sp)\right]$$

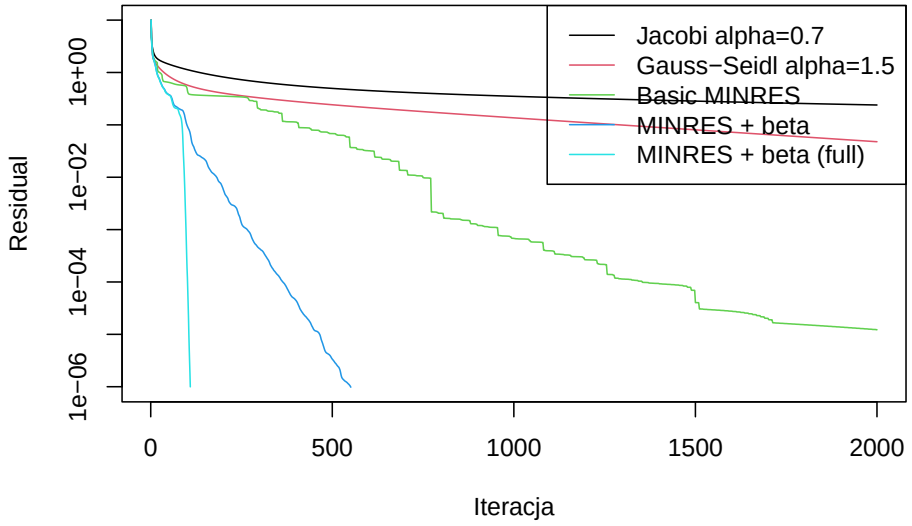
```
x = x0
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  if (i != 1) {
    Ap = S %*% p
    Aq = S %*% q
    beta = sum(Ap * Aq)/sum(Aq * Aq)
    p = p - beta * q
```

```
  }
  Ap = S %*% p
  alpha = sum(r * Ap)/sum(Ap * Ap)
  x = x + alpha*p
  if (residual(i,r,"MINRES + beta")) break
  q = p
}
draw.residuals()
```



Widać natychmiast, że działanie tak zmodyfikowanej metody MINRES jest szybsze, ale też bardziej stabilne (bez długich płaskich fragmentów). Rozumowanie takie można pociągnąć dłużej i zachowywać wszystkie wcześniejsze wektory, by użyć ich by poprawiać każdy kolejny kierunek.

```
x = x0
q = NULL
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  if (i != 1) {
    Ap = S %*% p
    Aq = S %*% q
    beta = solve(t(Aq) %*% Aq, t(Aq) %*% Ap)
    p = p - q %*% beta
  }
  Ap = S %*% p
  alpha = sum(r * Ap)/sum(Ap * Ap)
  x = x + alpha*p
  if (residual(i,r,"MINRES + beta (full)")) break
  q = cbind(p,q)
}
draw.residuals()
```



Taka metoda ma bardzo szybką zbierzność, lecz wymaga w ogólności przechowywania bardzo dużej ilości wektorów. Wymaga także odwracania macierzy $\left[(Sq)^T(Sq)\right]$ która z iteracji na iterację robi się coraz większa. Macierz ta jest też często źle

uwarunkowana i poprawna implementacja tej metody wymaga troche dodatkowej uwagi. Zazwyczaj resetuje się zestaw wektorów q co jakiś czas by uniknąć narastających problemów.

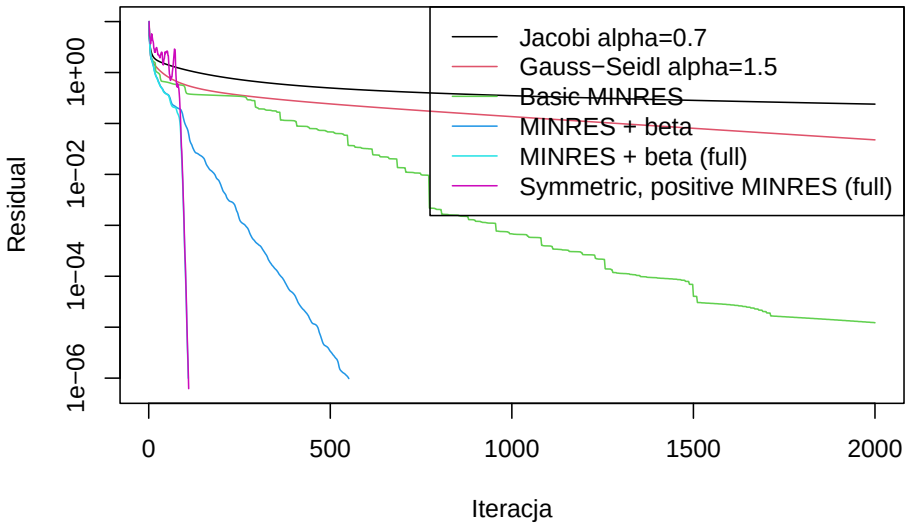
Dodatnio określona macierz symetryczna

Jeśli macierz A jest symmetryczna, to rozwiązanie układu $Ax = b$ jest równoważnie nie tylko z minimalizacją residualu $(r^T r)$, ale też z minimalizacją $a(x) = x^T Ax - 2x^T b$. Jedyna różnica jaka z tego wynika, to inna formuła na α i β:

$$\alpha = \frac{r^T Ap}{p^T Ap}$$

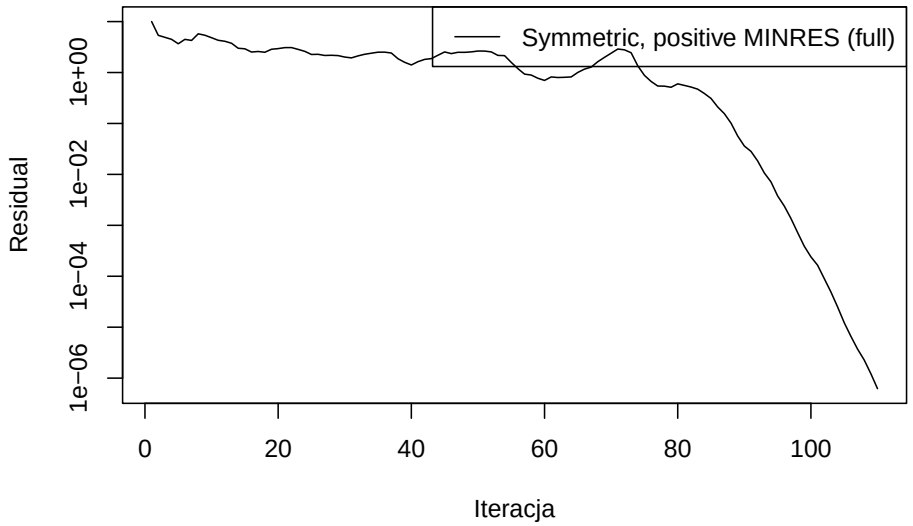
$$\beta = \left[q^T Aq\right]^{-1} \left[q^T Ap\right]$$

```
x = x0
q = NULL
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  if (i != 1) {
    Aq = S %*% q
    beta = solve(t(Aq) %*% q, t(Aq) %*% p)
    p = p - q %*% beta
  }
  Ap = S %*% p
  alpha = sum(r * p)/sum(p * Ap)
  x = x + alpha*p
  if (residual(i,r,"Symmetric, positive MINRES (full)")) break
  q = cbind(p,q)
}
draw.residuals()
```



Taka metoda ma także bardzo dobrą zbierność. Widać jednak na wykresie, że zbierność jej jest nie monotoniczna:

```
draw.residuals("Symmetric, positive MINRES (full)")
```



Nie jest to niespodziewane, ponieważ minimalizujemy teraz $x^T Ax - xb$ (i funkcja ta monotocznie spada), a nie $\sum_i r_i^2$.

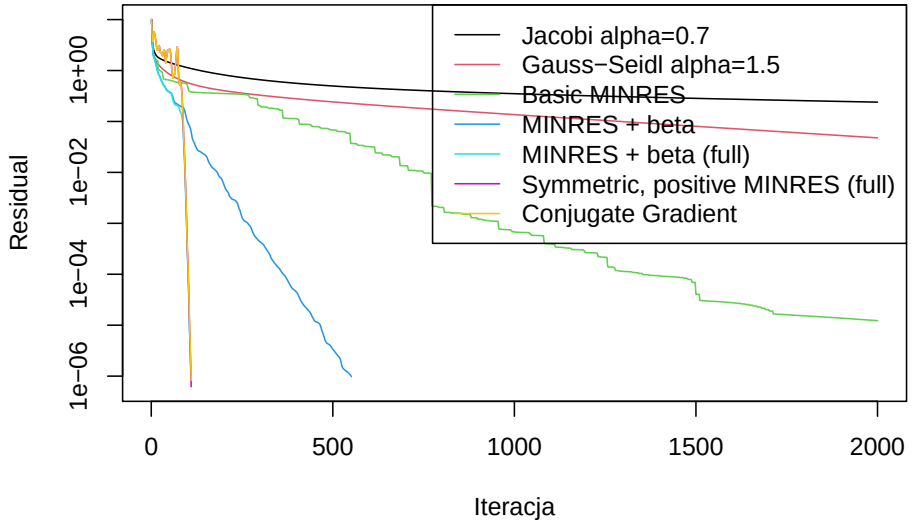
To czego nie widać odrazu, to to, że wektor β we wszystkich iteracjach ma tylko jeden niezerowy element (odpowiadający q bezpośrednio z poprzedniej iteracji). Dla przykładu β z ostatniej iteracji to:

```
print.few(beta,"\\beta")
```

β_1	β_2	$\cdots$	β_{105}	β_{106}	β_{107}	β_{108}	β_{109}
-	0	$\cdots$	0	0	0	0	0
0.2660422							

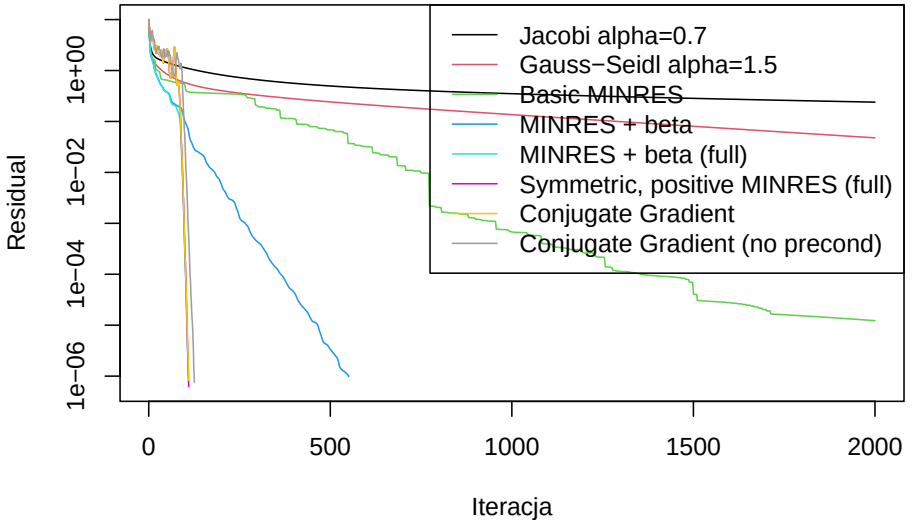
Nie jest to przypadek, tylko analityczna konsekwencja poprzednich iteracji. Pokazanie tego pozostawiam jako dobre ćwiczenie dla czytelnika. Właściwość ta (przypominam: dla macierzy symmetrycznych i dodatnio określonych) powoduje, że wystarczy zapisać jeden wektor q by uzyskać tak samo dobrą zbierzność jak przy zapisywaniu wszystkich. Taka metoda nazywa się Conjugate Gradient:

```
x = x0
for (i in 1:itmax) {
  r = F - S %*% x
  p = solve(P,r)
  if (i != 1) {
    Aq = S %*% q
    beta = sum(Aq * p)/sum(Aq * q)
    p = p - q %*% beta
  }
  Ap = S %*% p
  alpha = sum(r * p)/sum(p * Ap)
  x = x + alpha*p
  if (residual(i,r,"Conjugate Gradient")) break
  q = p
}
draw.residuals()
```



Warto na koniec zauważyć, że metoda ta ma na tyle dobrą zbierzność, że możemy jej użyć nawet bez jakiegokolwiek preconditionera (i troche przeorganizować kolejność obliczeń):

```
x = x0
r = F - S %*% x
q = r
for (i in 1:itmax) {
  if (residual(i,r,"Conjugate Gradient (no precond)")) break
  Aq = S %*% q
  alpha = sum(r * q)/sum(q * Aq)
  x = x + alpha*q
  r = r - alpha*Aq
  beta = sum(r * Aq)/sum(q * Aq)
  q = r - beta * q
}
draw.residuals()
```



Ilość iteracji potrzbnych do osiągnięcia wymaganego residuum:

```
it = tapply(resid$iteration,resid$name,max)
it[it==itmax] = paste(">",itmax)
kable(data.frame(Iteracji=it))
```

	Iteracji
Jacobi alpha=0.7	$>$ 2000
Gauss-Seidl alpha=1.5	$>$ 2000
Basic MINRES	$>$ 2000
MINRES + beta	551
MINRES + beta (full)	109
Symmetric, positive MINRES (full)	110
Conjugate Gradient	110
Conjugate Gradient (no precond)	126