Corso di Laurea Specialistica in Ingegneria Meccanica e in Ingegneria dell'Energia

Progetto numerico al calcolatore

Parte I - Appendice

Implementazione del metodo del Gradiente Coniugato Modificato (GCM) per la soluzione di sistemi lineari sparsi, simmetrici e definiti positivi

Indice

1 Cosa portare all'esame come allegato al Progetto **1**

1.1 Matrici test 1

1.2 Applicazione del CGM 1

1.2.1 Dati di input 1

1.2.2 Il vettore iniziale $\mathbf{x}_0$ 2

1.2.3 Scelta del precondizionatore 2

1.2.4 Dati di output 2

1.2.5 Casi test e profili di convergenza 3

1.2.6 Casi particolari 4

1.2.7 Facoltativo 4

1 Cosa portare all'esame come allegato al Progetto

L'implementazione del metodo del Gradiente Coniugato Modificato (GCM) costituisce una parte molto importante nel Progetto relativo alla Conduzione di calore in una piastra metallica piana, omogenea e isotropa.

È bene, quindi, scrivere in maniera corretta un codice per la soluzione di sistemi lineari mediante il CGM, e testarlo nella risoluzione di sistemi di cui si conosce la soluzione esatta.

Questo codice diventerà un sottoprogramma nel programma che risolverà il problema della conduzione di calore.

1.1 Matrici test

In rete, all'indirizzo `http://dispense.dmsa.unipd.it/` è possibile scaricare i files (in formato testo) che contengono i vettori `SYSMAT, JA, IA` di 3 matrici di dimensioni 100×100, 48×48 e 132×132 rispettivamente.

Queste matrici derivano da problemi di ingegneria e di matematica applicata e sono tratte dalla Harwell-Boeing Collection (`http://math.nist.gov/MatrixMarket/`).

Il termine noto $\mathbf{b}$ da associare a queste matrici deve essere costruito facendo la somma degli elementi di ciascuna riga di A in modo che la soluzione esatta sia data dal vettore $\mathbf{x}$ con elementi tutti uguali a 1.

1.2 Applicazione del CGM

1.2.1 Dati di input

Per ogni caso test, dunque, i dati di input sono

- la matrice espressa in forma compatta, tramite i vettori `SYSMAT, JA, IA`;
- il vettore del termine noto $\mathbf{b}$;
- il numero massimo di iterazioni, *itmax* entro cui ottenere la soluzione approssimata del problema;
- la tolleranza *tol* (per esempio $tol = 10^{-10}$ o 10^{-12}) che serve per controllare la norma del residuo relativo: se la norma del residuo relativo è inferiore alla tolleranza prefissata allora vuol dire che il CGM è arrivato a convergenza e approssima la soluzione $\mathbf{x}$ a meno della tolleranza prefissata. Il residuo relativo del CGM è dato dalla formula

  $$r_r = \frac{\|\mathbf{r}_{k+1}\|}{\|\mathbf{b}\|}$$

dove $\|\cdot\|$ è la norma euclidea e $k+1$ è l'iterazione corrente. In questa formula $\mathbf{r}_{k+1}$ è calcolato tramite la formula ricorsiva del CGM.

Ricordiamo che al termine delle iterazioni del CGM bisogna verificare che $r_r < toll$ anche per il residuo vero $\mathbf{r}_{k+1} = \mathbf{b} - A\mathbf{x}_{k+1}$ (confronta la Sezione 1 della Parte I di questa dispensa): si implementi il programma in modo che, in corrispondenza dell'approssimazione finale della soluzione del sistema, venga stampato il valore del residuo relativo calcolato sia tramite la formula ricorsiva del GCM sia mediante la formula esatta;

- il vettore iniziale $\mathbf{x}_0$ per il metodo del CGM;
- la scelta del precondizionatore.

1.2.2 Il vettore iniziale $\mathbf{x}_0$

Il vettore iniziale per il CGM viene dato dall'applicazione del metodo delle Correzioni Residue (CR).

Per ogni matrice test, si provi il metodo CGM partendo dal vettore iniziale $\mathbf{x}_0$ ottenuto applicando lo schema CR 0, 1, 2, 5, 10 e 20 volte, rispettivamente.

Osserviamo che applicare 0 iterazioni dello schema CR vuol dire partire, nel metodo CGM, dal punto di partenza dello schema CR stesso, vale a dire da $\mathbf{x}_0 = K^{-1}\mathbf{b}$.

1.2.3 Scelta del precondizionatore

Per ogni matrice test, si faccia girare il codice del CGM scegliendo come precondizionatore sia il precondizionatore diagonale $K^{-1} = D^{-1}$ sia il precondizionatore che si ottiene dalla decomposta incompleta di Cholesky $K^{-1} = (\tilde{L}\tilde{L}^T)^{-1}$.

1.2.4 Dati di output

All'esame si porterà una breve relazione in cui si descrive il problema affrontato, si riportano i risultati principali ottenuti dal programma, commentandoli opportunamente, insieme a dei grafici di convergenza. Tra i dati di output, anche se è conveniente che il programma stampi il vettore che approssima la soluzione del sistema su un file di testo, per ragioni pratiche non conviene riportare questo file di testo nella relazione (pensiamo alle pagine che occuperebbe la stampa di un vettore di oltre 1000 componenti o a quali caratteri microscopici dovremmo ricorrere per compattare la stampa....).

Tuttavia, per un confronto diretto della bontà della soluzione ottenuta, si può calcolare la norma euclidea dell'errore. In tal modo abbiamo un solo valore numerico da riportare nella relazione per ogni caso test.

Ricapitalando, per ogni caso test, i valori numerici essenziali da riportare sulla relazione sono:

- quante iterazioni k sono state effettuate per arrivare a convergenza
- la norma euclidea dell'errore $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}\|$ rispetto alla soluzione approssimata $\mathbf{x}_k$
- i valori della norma del residuo relativo calcolato nelle due modalità (formula ricorsiva del GCM e formula esatta) per la soluzione approssimata.

1.2.5 Casi test e profili di convergenza

Per ogni matrice test e a parità di tolleranza fissata, si faranno le seguenti simulazioni:

1. partire dal vettore di partenza $\mathbf{x}_0$ dello schema CR e precondizionatore diagonale: 0 CR e $K^{-1} = D^{-1}$
2. 1 iterazione dello schema CR per ottenere $\mathbf{x}_0$ e precondizionatore diagonale: 1 CR e $K^{-1} = D^{-1}$
3. 2 CR e $K^{-1} = D^{-1}$
4. 5 CR e $K^{-1} = D^{-1}$
5. 10 CR e $K^{-1} = D^{-1}$
6. 20 CR e $K^{-1} = D^{-1}$
7. 0 CR e $K^{-1} = (\tilde{L}\tilde{L}^T)^{-1}$
8. 1 CR e $K^{-1} = (\tilde{L}\tilde{L}^T)^{-1}$
9. 2 CR e $K^{-1} = (\tilde{L}\tilde{L}^T)^{-1}$
10. 5 CR e $K^{-1} = (\tilde{L}\tilde{L}^T)^{-1}$
11. 10 CR e $K^{-1} = (\tilde{L}\tilde{L}^T)^{-1}$
12. 20 CR e $K^{-1} = (\tilde{L}\tilde{L}^T)^{-1}$

Per confrontare meglio tutti i risultati si facciano i profili di convergenza in scala semilogaritmica: si ponga sull'asse delle ascisse il numero di iterazioni effettuate per arrivare a convergenza e sull'asse delle ordinate la norma euclidea del residuo relativo (ottenuto dalla formula ricorsiva).

Per ciascuna matrice test, si facciano due grafici, uno per ogni precondizionatore utilizzato, per mettere a confronto le varie simulazioni.

I grafici vanno inseriti nella relazione con opportuno commento.

1.2.6 Casi particolari

Per le matrici in cui si osserva una discrepanza notevole tra i residui relativi calcolati con la formula ricorsiva e quella esatta e per cui si nota che la soluzione approssimata è lontana dalla soluzione esatta, è opportuno modificare leggermente il codice in modo da farsi stampare, ad ogni passo, la norma del residuo relativo calcolato con la formula esatta. Si faccia quindi il grafico semilogaritmico della norma del residuo relativo (con formula esatta) e lo si confronti con il corrispondente grafico in cui il residuo relativo è calcolato con la formula ricorsiva.

1.2.7 Facoltativo

Visto che per questi esempi test è nota la soluzione esatta, si possono aggiungere poche righe di codice all'interno dell'algoritmo del GCM, in modo da calcolare, non solo alla fine, ma ad ogni iterazione, la norma euclidea dell'errore $\|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}\|$. Quindi, per ogni caso test si può fare il grafico semilogaritmico del profilo di convergenza ponendo sull'asse delle ascisse il numero di iterazioni effettuate per arrivare a convergenza e sull'asse delle ordinate la norma euclidea dell'errore.

Questi grafici, insieme a quelli sul residuo relativo, possono essere utili per una più esauriente comprensione del comportamento dello schema del GCM.

All'esame non sono ammessi grafici, relazioni e codici fotocopiati. Tutto il materiale deve essere portato in originale.

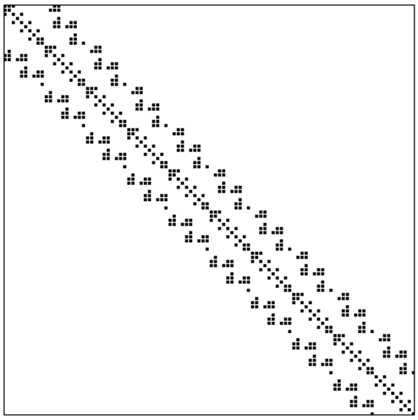

FIGURA 1: *Pattern della matrice NOS4 di dimensione* 100×100 *con 347 elementi non nulli*

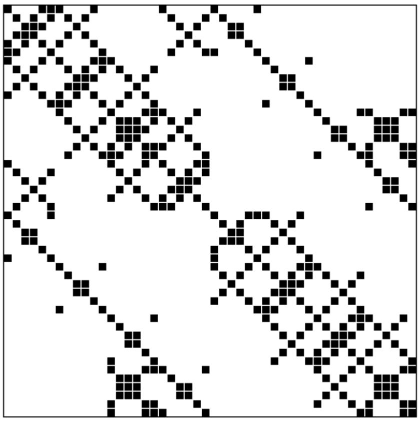

FIGURA 2: *Pattern della matrice BCSSTK01 di dimensione* 48×48 *con 224 elementi non nulli*

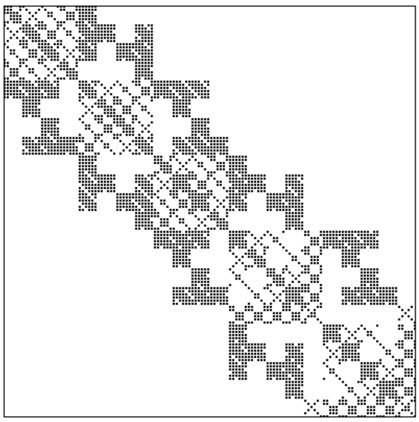

FIGURA 3: *Pattern della matrice BCSSTK04 di dimensione* 132×132 *con 1890 elementi non nulli*