Badanie efektywności blokowej metody Cholesky'ego-Banachiewicza w rozwiązywaniu układów równań

Metody Numeryczne: Projekt 2

Autor: Adam Kaniasty

08.12.2023

Spis treści

1 Opis metody matematycznej

1.1 Generowanie losowych macierzy dodatnio określonych

Charakterystyka badanych macierzy W ramach projektu analizie podlegają macierze symetryczne i dodatnio określone A o wymiarach $n \times n$, gdzie $n = 3p$. Macierze te są specjalnego typu, zwanego macierzami blokowymi, charakteryzującymi się strukturą podziału na mniejsze bloki macierzy:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & 0 \\ A_{12}^T & A_{22} & A_{23} \\ 0 & A_{23}^T & A_{33} \end{bmatrix}$$

gdzie każdy blok A_{ij} jest dodatnio określoną macierzą $p \times p$.

Generowanie losowych macierzy dodatnio określonych wymaga zastosowania metod matematycznych gwarantujących, że wszystkie wartości własne macierzy będą dodatnie. W funkcji `randomMatrixGenerator`, kluczowym elementem jest zapewnienie dodatniej określoności macierzy za pomocą rozkładu spektralnego.

Rozkład spektralny jest metodą wykorzystywaną do przedstawienia macierzy symetrycznej A jako iloczynu macierzy ortogonalnej Q, macierzy diagonalnej Λ, zawierającej wartości własne, oraz transpozycji macierzy ortogonalnej Q^T, co matematycznie wyraża się jako $A = Q\Lambda Q^T$. Wartości własne są generowane losowo z zakresu dodatnich liczb rzeczywistych, a następnie umieszczane na przekątnej macierzy Λ. Macierz ortogonalna Q jest generowana poprzez zastosowanie procesu ortogonalizacji na losowej macierzy. Każdy blok diagonalny macierzy A jest w ten sposób generowany niezależnie, a wynikowy blok jest wstawiany do odpowiedniej lokalizacji w macierzy A.

1.2 Metoda Cholesky'ego-Banachiewicza

Metoda Cholesky'ego-Banachiewicza jest algorytmem służącym do rozkładu macierzy symetrycznej, dodatnio określonej na iloczyn macierzy trójkątnej dolnej i jej transpozycji. Jest to szczególny przypadek rozkładu LU, gdzie macierz L jest macierzą trójkątną dolną, a macierz U jest jej transpozycją. Kluczowym elementem metody jest fakt, że każda symetryczna, dodatnio określona macierz A może być przedstawiona jako $A = LL^T$, gdzie L jest macierzą trójkątną dolną.

Aby wyznaczyć macierz L w metodzie Cholesky'ego-Banachiewicza, należy podjąć następujące kroki. Zakładamy, że dana jest symetryczna, dodatnio określona macierz A o wymiarach $n \times n$.

1. Obliczanie $L_{ii} = \sqrt{A_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{ik}^2}$. Jest to element diagonalny macierzy L.

2. Dla każdego j od $i+1$ do n, obliczanie elementów pozadiagonalnych $L_{ji} = \frac{1}{L_{ii}} \left(A_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{jk} L_{ik} \right)$.

Macierz L wyznaczona w ten sposób wymaga realizacji operacji pierwiastkowania i dzielenia, co podkreśla konieczność, aby macierz A była dodatnio określona.

1.3 Blokowa Metoda Choleskiego-Banachiewicza

Blokowa metoda Choleskiego-Banachiewicza stanowi zaawansowaną wersję standardowej metody Choleskiego. Umożliwia ona rozkładanie symetrycznych, dodatnio określonych macierzy A na iloczyn macierzy trójkątnej dolnej L i jej transpozycji L^T, przy czym operacje wykonywane są na blokach macierzy.

Załóżmy, że mamy macierz A o wymiarach $n \times n$, którą dzielimy na bloki o rozmiarach $b \times b$, gdzie b jest ustaloną wielkością bloku. Procedura rozkładu blokowego przedstawia się następująco:

1. Macierz A dzielona jest na bloki:

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1m} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{m1} & A_{m2} & \cdots & A_{mm} \end{pmatrix}$$

   gdzie każdy A_{ij} jest blokiem macierzy o wymiarach $b \times b$.

2. Analogicznie, macierz L również dzielona jest na bloki:

$$L = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ L_{21} & L_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ L_{m1} & L_{m2} & \cdots & L_{mm} \end{pmatrix}$$

3. Dla każdego bloku na przekątnej macierzy A, stosujemy standardowy algorytm rozkładu Choleskiego do obliczenia odpowiedniego bloku L_{ii} w macierzy L.

4. Następnie, dla bloków poniżej przekątnej, obliczamy L_{ji} korzystając z zależności:

$$L_{ji} = (A_{ji} - \sum_{k=1}^{i-1} L_{jk} L_{ik}^T) L_{ii}^{-T}$$

Po zakończeniu tych kroków, macierz L jest dolną macierzą trójkątną, spełniającą równanie $A = LL^T$.

1.4 Metoda Cholesky'ego-Banachiewicza w Rozwiązywaniu Układów Równań

Załóżmy, że naszym zadaniem jest rozwiązanie układu równań $Ax = b$, gdzie A jest symetryczną, dodatnio określoną macierzą. Aby rozwiązać podany układ równań należy podjąć następujące kroki:

1. Rozkład Choleskiego: Znalezienie macierzy L, dla której zachodzi $A = LL^T$.
2. Rozwiązanie układu $Ly = b$ przy użyciu metody podstawienia w przód.
3. Rozwiązanie układu $L^T x = y$ przy użyciu metody podstawienia wstecz.

1.5 Blokowa Metoda Cholesky'ego-Banachiewicza w Rozwiązywaniu Układów Równań

Blokowa metoda Cholesky'ego rozszerza standardową metodę na przypadki, gdy macierz A podzielona jest na bloki.

1. Rozkład Blokowy Choleskiego: Znalezienie macierzy trójkątnej dolnej L w formie blokowej, dla której $A = LL^T$.
2. Rozwiązanie układu $Ly = b$ przy użyciu metody podstawienia w przód z blokami.
3. Rozwiązanie układu $L^T x = y$ przy użyciu metody podstawienia wstecz z blokami.

1.6 Metoda Podstawienia w Przód

Metoda podstawienia w przód stosowana jest do rozwiązywania układów równań liniowych z macierzą współczynników będącą dolną macierzą trójkątną. Rozważmy układ równań $Lx = b$, gdzie L jest dolną macierzą trójkątną.

1. Rozpoczęcie od pierwszego równania w postaci $L_{11}x_1 = b_1$ i wyznaczenie $x_1 = \frac{b_1}{L_{11}}$.
2. Dla każdego kolejnego równania i (od 2 do n), obliczenie x_i według wzoru:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij}x_j}{L_{ii}}$$

   gdzie L_{ij} to elementy macierzy L, a b_i to elementy wektora prawych stron.

1.7 Metoda Podstawienia w Tył

Metoda podstawienia w tył jest stosowana do rozwiązywania układów równań liniowych z macierzą współczynników będącą górną macierzą trójkątną. Rozpatrzmy układ równań $Ux = y$, gdzie U jest górną macierzą trójkątną.

1. Rozpoczęcie od ostatniego równania w formie $U_{nn}x_n = y_n$ i wyznaczenie $x_n = \frac{y_n}{U_{nn}}$.
2. Dla każdego równania i (od $n-1$ do 1, w kolejności malejącej), obliczenie x_i według wzoru:

$$x_i = \frac{y_i - \sum_{j=i+1}^{n} U_{ij}x_j}{U_{ii}}$$

   gdzie U_{ij} to elementy macierzy U, a y_i to elementy wektora prawych stron.

2 Opis działania programu

Projekt realizowany jest z użyciem środowiska MATLAB. Główna funkcja programu, nazwana `decomposition`, implementuje metodę Cholesky'ego-Banachiewicza do rozkładu macierzy symetrycznych, dodatnio określonych na macierz trójkątną dolną L.

2.1 Funkcja `normalDecomposition`

Funkcja `normalDecomposition` wykonuje rozkład macierzy kwadratowej A na macierz trójkątną dolną L zgodnie z algorytmem standardowego rozkładu Cholesky'ego.

Parametry wejścia

- **Macierz** A: Macierz kwadratowa, dla której będzie przeprowadzany rozkład.

Parametry wyjścia

- **Macierz** L: Macierz trójkątna dolna, będąca wynikiem rozkładu macierzy A.

2.2 Funkcja `normalSolve`

Funkcja `normalSolve` rozwiązuje układ równań liniowych $Ax = b$ wykorzystując podany rozkład Cholesky'ego macierzy A.

Parametry wejścia

- **Macierz** A: Macierz kwadratowa z układu równań $Ax = b$.
- **Wektor** b: Wektor prawych stron układu równań.
- **decomposition**: Funkcja rozkładu Cholesky'ego-Banachiewicza, służąca do przekształcenia macierzy A w macierz trójkątną dolną L.

Parametry wyjścia

- **Wektor** x: Rozwiązanie układu równań $Ax = b$.

2.3 Funkcja `blockDecomposition`

Funkcja `blockDecomposition` wykonuje blokowy rozkład Cholesky'ego dla symetrycznej, dodatnio określonej macierzy A. Macierz jest dzielona na bloki 9 bloków, a wynikiem jest macierz trójkątna dolna L, taka że $LL^T = A$.

Parametry wejścia

- **Macierz** A: Symetryczna, dodatnio określona macierz kwadratowa do rozkładu.

Parametry wyjścia

- **Macierz** L: Macierz trójkątna dolna wynikająca z rozkładu blokowego macierzy A.

2.4 Funkcja `blockSolve`

Funkcja `blockSolve` rozwiązuje układ równań liniowych $Ax = b$ wykorzystując blokowy rozkład Cholesky'ego macierzy A.

Parametry wejścia

- **Macierz** A: Macierz kwadratowa w układzie równań $Ax = b$.
- **Wektor** b: Wektor prawych stron w układzie równań.
- **decomposition**: Funkcja realizująca blokowy rozkład Cholesky'ego macierzy A.

Parametry wyjścia

- **Wektor** x: Rozwiązanie układu równań $Ax = b$.

2.4.1 Funkcja `forwardSubstitutionBlock`

Funkcja `forwardSubstitutionBlock` wykonuje forward substitution dla blokowej macierzy trójkątnej dolnej L i wektora b, rozwiązując $Ly = b$ dla y.

2.4.2 Funkcja `backwardSubstitutionBlock`

Funkcja `backwardSubstitutionBlock` wykonuje backward substitution dla transponowanej blokowej macierzy trójkątnej górnej U i wektora y, rozwiązując $Ux = y$ dla x.

2.5 GUI

Poniżej znajduje się opis parametrów w poszczególnych zakładkach GUI

2.5.1 Examples

- Wybór przykładu: Możliwość wyboru jednego z sześciu przykładów.

2.5.2 CB error

- maxP: Rozmiar macierzy blokowej.
- maxScale: Rozmiar wartości w macierzy. (brana jest co dziesiąta wartość)

2.5.3 CB solve error

- maxP: Maksymalny rozmiar macierzy blokowej (będą przetwarzane wartości 1:maxP)
- scale: Rozmiar wartości w macierzy.
- xScale: Rozmiar wartości x podczas generowania równań
- n: Ilośc powtórzeń dla każdej konfiguracji (wartość błędu jest uśredniana)

2.5.4 CB dependency error

- maxP: Maksymalny rozmiar macierzy blokowej (będą przetwarzane wartości 1:maxP)
- maxScale: Rozmiar wartości w macierzy.
- xScale: Rozmiar wartości x podczas generowania równań
- n: Ilośc powtórzeń dla każdej konfiguracji (wartość błędu jest uśredniana)

2.5.5 Matrix error

- P: Rozmiar macierzy blokowej.
- Scale: Rozmiar wartości w macierzy.

3 Przykłady

Macierze 1-5 spełniają wcześniej opisaną własność (1.3)

3.1 Przykład 1

Pierwsza macierz (examples{1}) jest macierzą pełną, z różnymi wartościami w każdym elemencie.

3.2 Przykład 2

Druga macierz (examples{2}) jest podobna do pierwszej, ale z wartościami tylko w blokach na przekątnej.

3.3 Przykład 3

Trzecia macierz (examples{3}) zawiera bardzo duże wartości (1e6), w blokach na przekątnej.

3.4 Przykład 4

Czwarta macierz (examples{4}) składa się z bardzo małych wartości (1e-6).

3.5 Przykład 5

Piąta macierz (examples{5}) łączy małe i duże wartości: małe na przekątnej (1e-6) i duże w innych blokach.

3.6 Przykład 6

Szósta macierz (examples{6}) jest generowana losowo.

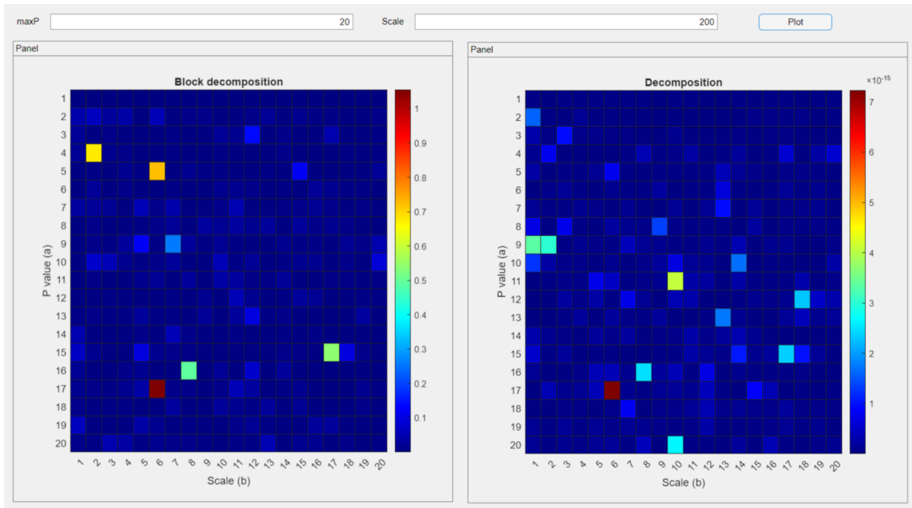
4 Pomiary błędów

4.1 Błędy Dekompozycji

Rozważamy błąd względny dekompozycji macierzy A na iloczyn $L \cdot L^T$, gdzie L jest macierzą trójkątną dolną. Błąd względny E dla dekompozycji jest zdefiniowany jako:

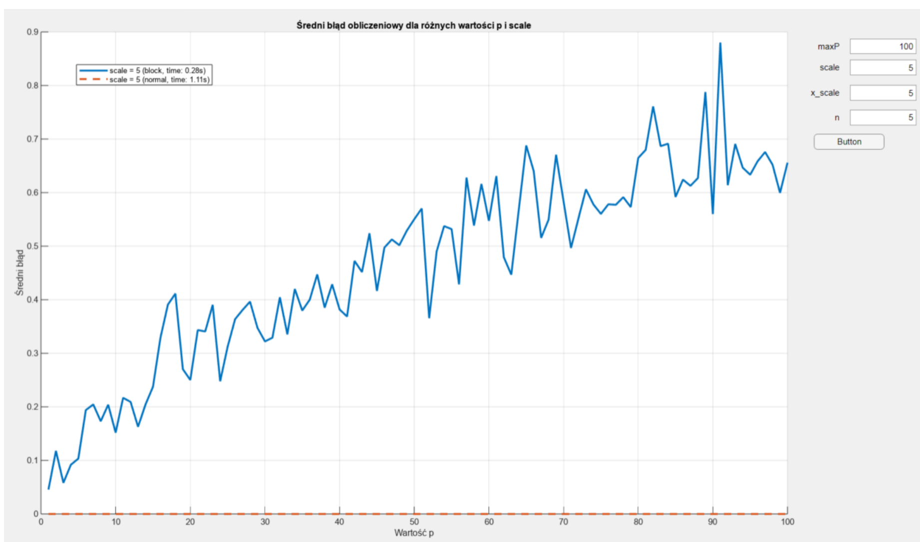
$$E = \frac{\left\| \frac{A - L \cdot L^T}{A} \right\|_1}{n^2}$$

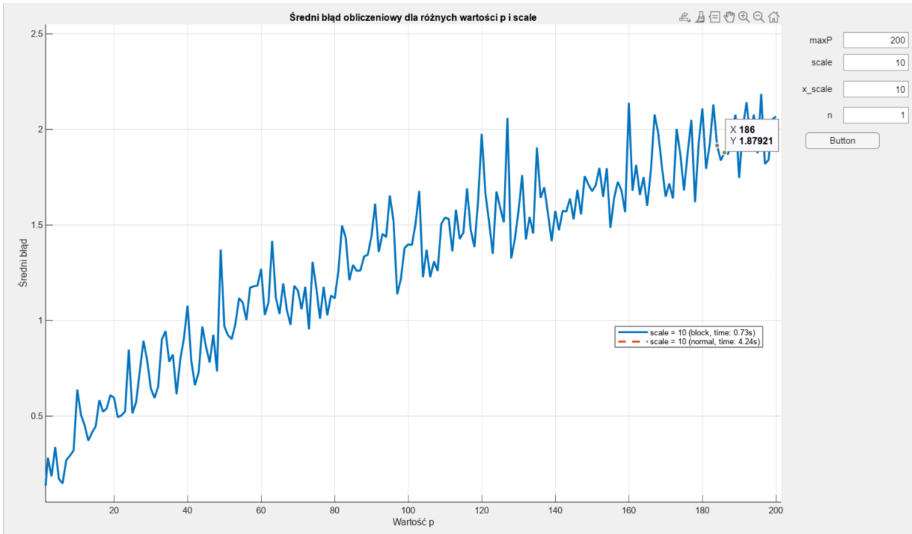
gdzie $\| \cdot \|_1$ oznacza normę 1 macierzy. Średnia wartość błędu E jest obliczana na podstawie 10 losowo generowanych macierzy dla każdej pary wartości parametru P i skali.

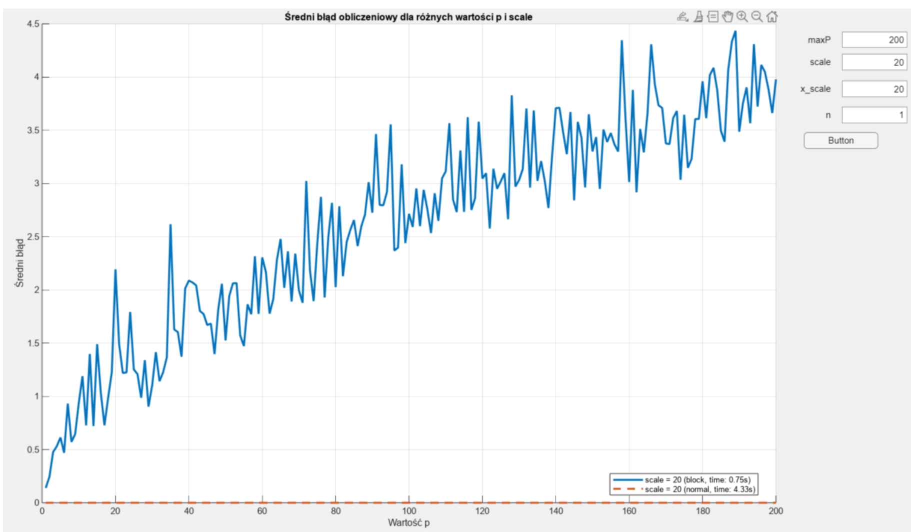


4.2 Błędy Rozwiązania Układu Równań

Dla każdej wartości parametru p z pewnego przedziału generujemy n macierzy i n układów równań. Następnie rozwiązujemy te równania metodą Cholesky'ego-Banachiewicza, obliczając średni błąd rozwiązania. Poniżej kilka przykładów







5 Zastosowania

Analiza Głównych Składowych (PCA)

Analiza Głównych Składowych (PCA) to technika statystyczna używana do redukcji wymiarowości danych poprzez przekształcenie do nowego układu współrzędnych, w którym pierwsza główna składowa ma największą wariancję, a każda kolejna składowa ma jak największą wariancję pod warunkiem bycia ortogonalną do poprzednich. Metodę blokową używa się przy okazji dekompozycji macierzy kowariancji.

6 Wnioski

W ramach przeprowadzonych badań porównano wydajność oraz dokładność dwóch metod rozkładu Cholesky'ego: standardowej oraz blokowej. Poniżej przedstawiono główne wnioski z przeprowadzonych analiz:

1. **Wyższa Wydajność Metody Blokowej:** Metoda blokowa wykazała znacznie wyższą wydajność w porównaniu z metodą standardową, zwłaszcza dla dużych macierzy.

2. **Większe Błędy Metody Blokowej:** Pomimo wyższej wydajności, metoda blokowa ma tendencję do generowania większych błędów numerycznych w porównaniu z metodą standardową. Może to być wynikiem zaokrągleń oraz akumulacji błędów w trakcie przetwarzania bloków.

3. **Podobna Wydajność dla Małych Macierzy:** Dla małych macierzy, różnice w wydajności między metodami blokową a standardową są marginalne, a obie metody wykazują podobne charakterystyki dokładności.

4. **Efektywne wykorzystanie zasobów komputera:** Pracując z dużymi macierzami, metoda blokowa pozwala na podzielenie zadania na podproblemy wymagające mniejszej ilości zasobów.

5. **Preferencja dla Macierzy o Blokach na Przekątnej:** Metoda blokowa jest szczególnie efektywna dla macierzy, które posiadają naturalny podział na bloki na przekątnej. W takich przypadkach, wykorzystanie struktury blokowej macierzy pozwala na znaczące przyspieszenie obliczeń.

6. **Podobne Niekorzystne Przypadki:** Zarówno metoda standardowa, jak i blokowa mają podobne scenariusze, w których ich wydajność jest ograniczona. Należą do nich macierze o szczególnie niekorzystnych właściwościach numerycznych, gdzie akumulacja błędów może znacząco wpływać na dokładność rozwiązania.

Podsumowując, wybór między metodą standardową a blokową powinien być dokonywany na podstawie rozmiaru i struktury macierzy oraz wymagań dotyczących dokładności rozwiązania.