Sprawozdanie z listy piątej

Karolina Bąk

Styczeń 2020

1 Wstęp

Celem tej listy zadań było stworzenie efektywnych algorytmów obliczających układ równań liniowych postaci $Ax = b$, gdzie $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ jest macierzą współczynników o specyficznej strukturze, x jest wektorem niewiadomych, a $b \in \mathbb{R}^n, n \geqslant 4$ jest wektorem prawych stron, bazując na eliminacji Gaussa oraz rozkładzie LU.

1.1 Struktura macierzy A

Macierz A jest tridiagonalnie blokowa oraz rzadka. Jej strukturę można przedstawić w następujący sposób:

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ B_2 & A_2 & C_2 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & B_3 & A_3 & C_3 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & B_{v-2} & A_{v-2} & C_{v-2} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & B_{v-1} & A_{v-1} & C_{v-1} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & B_v & A_v \end{pmatrix},$$

gdzie $v = \frac{n}{l}$, zakładając, że n jest podzielne przez l, $l \geqslant 2$ jest rozmiarem wszystkich kwadratowych macierzy wewnętrznych: A_k, B_k i C_k.

Macierz $A_k \in \mathbb{R}^{l \times l}, k = 1 \dots v$ jest macierzą gęstą. Macierz $B_k \in \mathbb{R}^{l \times l}, k = 2 \dots v$ jest następującej postaci:

$$B_k = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & b^k_{1l-1} & b^k_{1l} \\ 0 & \dots & 0 & b^k_{2l-1} & b^k_{2l} \\ \vdots & \dots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & b^k_{ll-1} & b^k_{ll} \end{pmatrix}$$

Natomiast $C_k \in \mathbb{R}^{l \times l}, k = 1 \dots v-1$ jest macierzą diagonalną:

$$C_k = \begin{pmatrix} c_1^k & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2^k & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & c_{l-1}^k & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & c_l^k \end{pmatrix}$$

Z uwagi na specyficzną naturę macierzy A przechowuję ją w pamięci przy użyciu struktury z modułu SparseArrays. Dzięki temu przechowuję jedynie niezerowe elementy macierzy i oszczędzam pamięć. Na potrzeby późniejszej analizy algorytmów przyjmuję, że dostęp do pojedynczego elementu odbywa się w czasie stałym, choć jest to nieprawda i będzie można zauważyć to w czasie działania algorytmów.

2 Rozwiązywanie układu Ax = b metodą eliminacji Gauss'a

Aby rozwiązać układ równań liniowych naturalnym wydaje się użyć eliminacji Gaussa. Klasyczny algorytm polega na sprowadzeniu wejściowego układu do macierzy trójkątnej górnej, wykorzystując do tego celu jedynie elementarne operacje (dodawanie, odejmowanie, mnożenie przez $l \neq 0$) na wierszach i kolumnach. Można także dowolnie przestawiać wiersze i kolumny macierzy. W efekcie otrzymujemy macierz, dzięki której, mając wektor prawych stron, możemy znaleźć wektor x zawierający rozwiązania układu równań.

W celu otrzymania wynikowej macierzy trójkątnej trzeba wyeliminować niezerowe elementy pod przekątną macierzy. Stosuje się w tym celu tak zwane *mnożniki*, oznaczane za pomocą l_{ij}. W pierwszym kroku eliminowana jest niewiadoma x_1 z $n-1$ równań odejmując dla $i = 2 \dots n$ odpowiednią krotność pierwszego równania od i-tego równania, aby wyzerować w nim współczynnik x_1. Zauważmy, że jest to równoznaczne z wyznaczeniem x_1 z pierwszego równania i podstawieniem do pozostałych równań. Zauważmy, że w celu wyzerowania elementu a_{ik} należy od i-tego wiersza odjąć k-ty wiersz pomnożony przez współczynnik (mnożnik) $l_{ik} = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$. Należy w tym momencie zauważyć, że algorytm nie zadziała jeśli na przekątnej wystąpi wartość 0. W tej wersji algorytmu można poradzić sobie z tym jedynie poprzez zamianę miejscami kolumn czy wierszy. Jednak nie należy zapomnieć o wprowadzeniu zmian także w wektorze prawych stron. Aby uzyskać wektor x, po zakończonej eliminacji Gaussa, trzeba wykorzystać algorytm podstawienia wstecz.

Złożoność tego algorytmu wynosi $\mathcal{O}(n^3)$

Aby poradzić sobie z możliwymi zerami na przekątnej można lekko zmodyfikować powyższy algorytm. Warunek $a_{kk} \neq 0$ na ogól nie zapewnia numerycznej

stabilności algorytmu. W celu zapobiegania problematycznym sytuacjom rozszerza się klasyczną eliminację Gaussa o wybór elementu głównego w kolumnie. Polega on na znalezieniu (z dokładnością do wartości bezwzględnej) największego elementu w kolumnie i przestawienie wierszy macierzy tak, aby wybrany element znalazł się w określonym miejscu na przekątnej. Można to wyrazić następującym wzorem:

$$|a_{kk}| = |a_{s(k),k}| = max\{|a_{ik}| : i = k \dots n\},$$

gdzie $s(k)$ jest wektorem permutacji, w którym zapisane są przestawienia wierszy.

Poniżej przedstawię modyfikacje powyższych algorytmów dla macierzy o zadanej strukturze, których złożoność zbiję teoretycznie do $\mathcal{O}(n)$

2.1 Bez wyboru elementu głównego

Aby lepiej zobrazować modyfikację algorytmu przedstawię kawałek macierzy A:

$$\begin{pmatrix}
a_{11}^1 & a_{12}^1 & a_{13}^1 & a_{14}^1 & c_{11}^1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\
a_{21}^1 & a_{22}^1 & a_{23}^1 & a_{24}^1 & 0 & c_{22}^1 & 0 & 0 & \dots \\
a_{31}^1 & a_{32}^1 & a_{33}^1 & a_{34}^1 & 0 & 0 & c_{33}^1 & 0 & \dots \\
a_{41}^1 & a_{42}^1 & a_{43}^1 & a_{44}^1 & 0 & 0 & 0 & c_{44}^1 & \dots \\
0 & 0 & b_{13}^2 & b_{14}^2 & a_{11}^2 & a_{12}^2 & a_{13}^2 & a_{14}^2 & \dots \\
0 & 0 & b_{23}^2 & b_{24}^2 & a_{21}^2 & a_{22}^2 & a_{23}^2 & a_{24}^2 & \dots \\
0 & 0 & b_{33}^2 & b_{34}^2 & a_{31}^2 & a_{32}^2 & a_{33}^2 & a_{34}^2 & \dots \\
0 & 0 & b_{43}^2 & b_{44}^2 & a_{41}^2 & a_{42}^2 & a_{43}^2 & a_{44}^2 & \dots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{pmatrix}.$$

Możemy zauważyć, że przy tej strukturze A należy wyeliminować w każdej kolumnie kolejno $3, 2, 5, 4, 3, 2, 5, 4 \dots$ elementów. A więc ilość wyeliminowanych elementów w każdej kolumnie można określić wzorem:

$$l - k \mod l \quad lub \quad 2l - k \mod l \quad dla\,(k \mod l) = (l - 1),$$

gdzie k jest numerem kolumny, a l rozmiarem macierzy blokowych.

Poniżej umieszczam pseudokod obrazujący eliminację Gaussa dostosowaną do macierzy o zadanej strukturze.

Input: Macierz rzadka A, wektor prawych stron b, rozmiar macierzy n, rozmiar macierzy blokowych l
Output: Wektor rozwiązań x

for $k \leftarrow 1$ ***to*** n **do**
  $elim \leftarrow (k \mod l) == (l-1) \quad ? \quad k + (2l - (k \mod l)) \quad : \quad k + (l - (k \mod l))$
  for $i \leftarrow k+1$ ***to*** $elim$ **do**
    $mult \leftarrow \frac{A[i,k]}{A[k,k]}$
    $A[i,k] \leftarrow 0$
    for $j \leftarrow k+1$ ***to*** $min(k+l, j)$ **do**
      $A[i,j] \leftarrow A[i,j] - A[k,j] * mult$
    end
    $b[i] \leftarrow b[i] - b[k] * mult$
  end
end
$x[1:n] \leftarrow \{0 \dots 0\}$
for $i \leftarrow n$ ***downto*** 1 **do**
  $sum \leftarrow 0$
  for $j \leftarrow i+1$ ***to*** $min(i+l, n)$ **do**
    $sum \leftarrow sum + A[i,j] * x[j]$
  end
  $x[i] \leftarrow \frac{b[i]-sum}{A[i,i]}$
end

return x

Można zauważyć, że główna pętla wykonuje się n razy, a te wewnętrzne najwyżej l razy, co daje złożoność $\mathcal{O}(n * l^2)$, co daje liniową złożoność, gdyż l jest stałą.

2.2 Z częściowym wyborem elementu głównego

Przerobiony wariant eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego jest bardzo podobny do przedstawionego wyżej algorytmu z tą małą różnicą, że posiada też wektor permutacji, w którym są zapisane przestawienia elementów w kolumnach.

Input: Macierz rzadka A, wektor prawych stron b, rozmiar macierzy n, rozmiar macierzy blokowych l
Output: Wektor rozwiązań x

```
perm[1 : n] ← {1 . . . n}
for k ← 1 to n do
    maxrow ← k
    maxelement ← |A[k, k]|
    elim ← (k mod l) == (l − 1) ? k + (2l − (k
     mod l)) : k + (l − (k mod l))
    for i ← k + 1 to elim do
        if A[k, i] ⩾ maxelement then
            maxelement ← |A[k, perm[i]]|
            maxrow ← i
        end
    end
    swap(perm[k], perm[maxrow])
    for i ← k + 1 to elim do
        mult ← A[perm[i],k] / A[perm[k],k]
        A[perm[i], k] ← 0
        for j ← k + 1 to min(k + 2l, j) do
            A[perm[i], j] ← A[perm[i], j] − A[perm[k], j] ∗ mult
        end
        b[perm[i]] ← b[perm[i]] − b[perm[k]] ∗ mult
    end
end
x[1 : n] ← {0 . . . 0}
for i ← n downto 1 do
    sum ← 0
    for j ← i + 1 to min(i + l, n) do
        sum ← sum + A[perm[i], j] ∗ x[j]
    end
    x[i] ← (b[perm[i]] − sum) / A[perm[i],i]
end

return x
```

W przypadku eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego złożoność odrobinę wzrośnie, lecz wciąż pozostanie liniowa. Na wzrost złożoności ma wpływ obecność pętli, w której wybierany jest element główny oraz fakt, że ostatnia pętla w głównej pętli wykona się $2l$ razy (ponieważ ostatni niezerowy element można stworzyć w kolumnie $2l$, gdy eliminujemy czynniki niezerowe z pierwszych $l - 1$ kolumn). Ostatecznie złożoność wyniesie $\mathcal{O}(n * (2l^2 + l))$

3 Rozwiązywanie układu Ax = b z uwzględnieniem rozkładu LU

Rozkład LU jest kolejną metodą rozwiązywania układów równań liniowych. Jest ściśle powiązana z metodą eliminacji Gaussa. W tym rozkładzie wyznacza się dwie macierze trójkątne: dolną **L** oraz górną **U**.

Dla zadanego układu równań $Ax = b$ macierz A można zapisać jako iloczyn macierzy **L** i **U**, gdzie:

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

Wtedy początkowy układ równań przyjmuje postać $LUx = b$. Jego rozwiązanie sprowadza się do rozwiązania następujących układów z każdą z utworzonych macierzy trójkątnych.

$$Ux = b'$$

$$Lb' = b$$

W celu zapewnienia jednoznaczności rozkładu na przekątnej jednej z powstałych podczas rozkładu macierzy znajdują się same jedynki.

Złożoność tego algorytmu jest nie większa niż $(O)(n^2)$.

3.1 Adaptacja algorytmów

Do optymalnego obliczania rozkładu zastosowałam przedstawione wcześniej algorytmy do eliminacji Gaussa, z tym, że zamiast zerować wartości pod przekątną umieszczam tam mnożnik użyty do eliminacji tego elementu. Nie liczę także wektora x, ani nie aktualizuję wektora prawych stron, gdyż te czynności wykonuję dopiero przy rozwiązywaniu układu przy użyciu tego rozkładu. Złożoność algorytmów jest taka sama, jak adaptowanych algorytmów.

Poniżej przedstawiam pseudokody algorytmów do obliczania $Ax = b$ przy pomocy obliczonego wcześniej rozkładu **LU** w wariantach z wyborem elementu głównego oraz bez. Złożoność obu algorytmów wynosi $\mathcal{O}(2n * l)$

3.2 Bez wyboru elementu głównego

Input: Macierz rzadka A, wektor prawych stron b, rozmiar macierzy n, rozmiar macierzy blokowych l
Output: Wektor rozwiązań x

$b'[1:n] \leftarrow \{0 \dots 0\}$
for $i \leftarrow 1$ ***to*** n **do**
  $sum \leftarrow 0$ **for** $j \leftarrow max(1, l - \frac{i-1}{l})$ ***to*** $i - 1$ **do**
    $sum \leftarrow sum + A[i,j]b'[j]$
  end
  $b'[i] = b[i] - sum$
end
$x[1:n] \leftarrow \{0 \dots 0\}$
for $i \leftarrow n$ ***downto*** 1 **do**
  $sum \leftarrow 0$
  for $j \leftarrow i + 1$ ***to*** $min(i + l, n)$ **do**
    $sum \leftarrow sum + A[i,j] * x[j]$
  end
  $x[i] \leftarrow \frac{b'[i]-sum}{A[i,i]}$
end

return x

3.3 Z częściowym wyborem elementu głównego

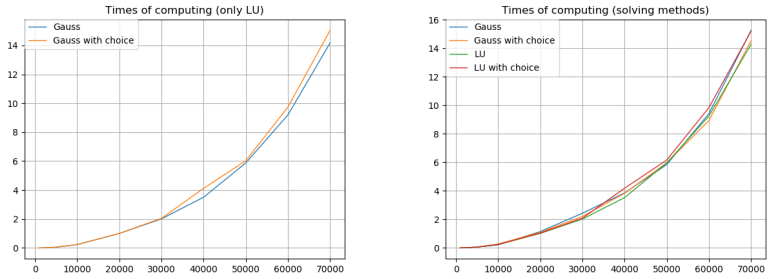
Input: Macierz rzadka A, wektor permutacji $perm$, wektor prawych stron b, rozmiar macierzy n, rozmiar macierzy blokowych l
Output: Wektor rozwiązań x

$b'[1:n] \leftarrow \{0 \dots 0\}$
for $i \leftarrow 1$ ***to*** n **do**
  $sum \leftarrow 0$ **for** $j \leftarrow max(1, l - \frac{i-1}{l})$ ***to*** $i-1$ **do**
    $sum \leftarrow sum + A[perm[i], j]b'[j]$
  end
  $b'[i] = b[perm[i]] - sum$
end
$x[1:n] \leftarrow \{0 \dots 0\}$
for $i \leftarrow n$ ***downto*** 1 **do**
  $sum \leftarrow 0$
  for $j \leftarrow i+1$ ***to*** $min(i+l, n)$ **do**
    $sum \leftarrow sum + A[perm[i], j] * x[j]$
  end
  $x[i] \leftarrow \frac{b'[i]-sum}{A[perm[i],i]}$
end

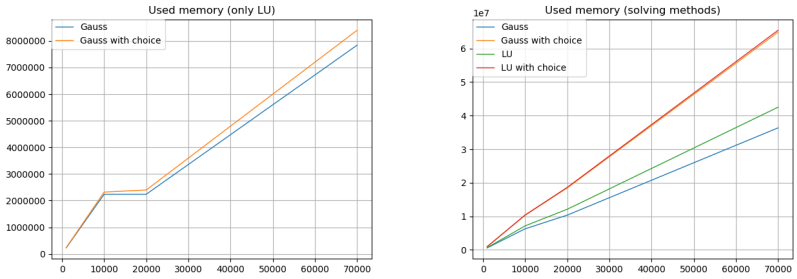
return x

4 Wyniki testów

Dla zaimplementowanych algorytmów przeprowadziłam testy, w których zbadałam złożoność pamięciową oraz czasową. Do uzyskania danych użyłam dostępnego w Julii makra **@timed**, zwracającego między innymi czas działania funkcji oraz zużytą pamięć. Wyniki przedstawię na poniższych wykresach:



Rysunek 1: Wykresy czasu działania: 1. tylko dla rozkładu LU, 2. wszystkie metody



Rysunek 2: Wykresy zużycia pamięci: 1. tylko dla rozkładu LU, 2. wszystkie metody

5 Obserwacje

Można zauważyć, że algorytmy używające LU oraz wyboru zużywają więcej pamięci, co jest zrozumiałe, gdyż w macierzy A jest pamiętany także rozkład LU, gdzie w zwykłej eliminacji te wartości zostały wyzerowane i wyrzucone z pamięci, a także jest konieczność pamiętania wektora permutacji. Z kolei rzeczywisty czas wykorzystywany przez programy jest funkcją kwadratową.

6 Wnioski

Na rzeczywisty czas wykonywania wpłynął fakt, że w SparseArrays odwoływanie się do elementów nie jest w czasie stałym. Jeśli jednak udało by się to uzyskać powyższe algorytmy działały by w czasie liniowym. Modyfikacje wprowadzone do klasycznych algorytmów znacznie zmniejszyły czas potrzebny na rozwiązywanie układów równań w tej postaci. Widać również, że użycie rozkładu LU jest trochę efektywniejsze czasowo (wersja bez wyboru) niż zwykła eliminacja Gaussa.

Wnioskiem wynikającym z tej listy jest fakt, że czasem niewielkie modyfikacje klasycznych algorytmów mogą znacząco wpłynąć na efektywność ich działania w specyficznych przypadkach i potrafią prowadzić do rozwiązania skomplikowanych problemów w dość łatwy sposób.