Sprawozdanie

Laboratorium 3
Metody obliczeniowe w nauce i technice

Wykonanie: Kamil Kurp

Metoda LU jest metodą rozwiązywania układu równań liniowych postaci:

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

W zapisie macierzowym $\mathbf{A} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y}$, gdzie $\mathbf{A}$ - macierz współczynników, $\mathbf{x}$ - wektor niewiadomych, $\mathbf{y}$ - wektor danych.

Pozwala także na szybkie wyliczenie wyznacznika macierzy $\mathbf{A}$.

W metodzie LU macierz współczynników zapisywana jest jako iloczyn dwóch macierzy trójkątnych: dolnej (ang. lower - $\mathbf{L}$) i górnej (ang. upper - $\mathbf{U}$), tj. z elementami zerowymi - odpowiednio - powyżej i poniżej przekątnej macierzy:

$$\mathbf{A} = \mathbf{L} \cdot \mathbf{U}$$

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \qquad \mathbf{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

Układ równań przyjmuje wówczas postać

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{y},$$

a jego rozwiązanie sprowadza się do rozwiązania dwóch układów równań z macierzami trójkątnymi, które z kolei rozwiązuje się bardzo prosto:

$$\mathbf{L} \cdot \mathbf{z} = \mathbf{y},$$
$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{x} = \mathbf{z}.$$

Ostatecznie liczba mnożeń, potrzebnych do wyznaczenia wektora $\mathbf{x}$, wynosi n^2, dodawań $n^2 - n$.

Wyznacznik macierzy $\mathbf{A}$ tej postaci można obliczyć korzystając z twierdzenia Cauchy'ego:

$$\mathbf{det}(\mathbf{L} \cdot \mathbf{U}) = \mathbf{det}(\mathbf{L}) \cdot \mathbf{det}(\mathbf{U}),$$

oraz z faktu, że wyznacznik macierzy trójkątnej jest iloczynem elementów na przekątnej. Otrzymujemy wówczas:

$$\mathbf{det}(\mathbf{A}) = \mathbf{det}(\mathbf{L} \cdot \mathbf{U}) = \mathbf{det}(\mathbf{L}) \cdot \mathbf{det}(\mathbf{U}) = l_{11} \cdot l_{22} \cdot \dots \cdot l_{nn} \cdot u_{11} \cdot u_{22} \cdot \dots \cdot u_{nn}.$$

Ponadto przeważnie przy rozkładzie LU na przekątnej jednej z macierzy znajdują się jedynki – wtedy wyznacznik macierzy $\mathbf{A}$ jest równy wyznacznikowi albo macierzy $\mathbf{L}$, albo $\mathbf{U}$, którego obliczenie wymaga wykonania $n-1$ mnożeń (zamiast $2n-1$).

Zalety metody:

- bardzo oszczędna gospodarka pamięcią;
- wymaga najmniejszej liczby operacji w porównaniu z innymi metodami dokładnymi (nie biorąc pod uwagę procedur specjalnych).

Złożoność algorytmu to O(n^3).

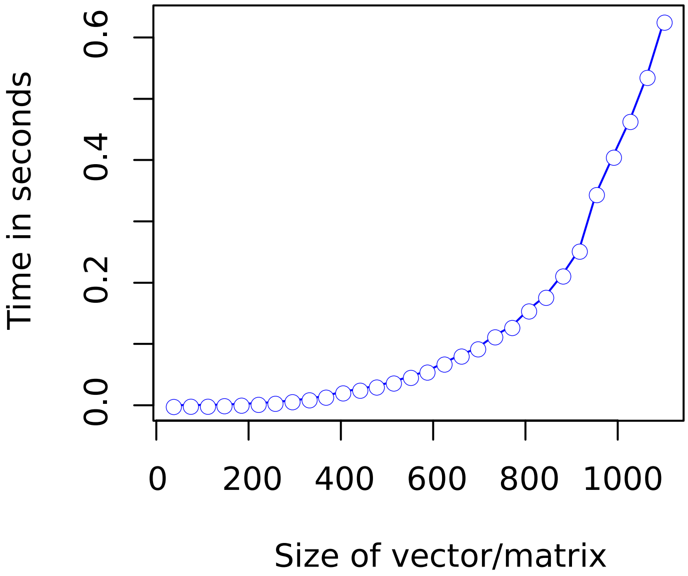
Podstawowym problemem numerycznym w tej metodzie jest dokonanie rozkładu LU macierzy współczynników. Żeby ten rozkład macierzy był jednoznaczny zakłada się, że elementy na głównej przekątnej jednej z macierzy, $\mathbf{L}$ albo $\mathbf{U}$, są równe 1.

Rozkład LU jest wyznaczany za pomocą metody Doolittle'a.

Ta metoda nie jest niezawodna, tzn. podczas obliczeń może wystąpić dzielenie przez zero. Istnieje jej modyfikacja pozbawiona tej wady, nazywana metodą Doolittle-Crouta, w której wykorzystuje się częściowy wybór elementu podstawowego.

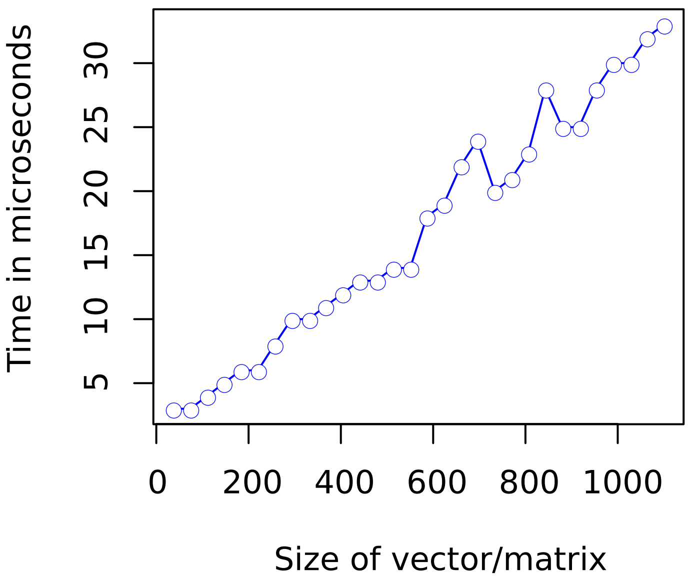
Element podstawowy to taki element w macierzy A, który jest używany do rugowania zmiennych (czyli zerowania odpowiadających im współczynników) z kolejnych równań. Przy stosowaniu metody Doolittle'a wybiera się element podstawowy zawsze z przekątnej głównej i jeśli a_{kk} jest równe zero, metoda zawodzi.

Dekompozycja LU



Wykres został wykonany na podstawie działania funkcji gsl_linalg_LU_solve. Wykonano 30 pomiarów dla różnych rozmiarów macierzy. Z wykresu można wywnioskować sześcienną złożoność czasową algorytmu.

Funkcja do macierzy trójdiagonalnych



Wykres został wykonany na podstawie działania funkcji gsl_linalg_solve_tridiag. Wykonano 30 pomiarów dla różnych rozmiarów macierzy. Wykres przypomina wykres złożoności liniowej.

Pomiary wykonano na sprzecie o poniższej specyfikacji:

Processor	8x Intel(R) Core(TM) i7-2670QM CPU @ 2.20GHz
Memory	4033MB
Operating System	Arch Linux

Kernel	Linux 4.4.3-1-ARCH (x86_64)
Compiled	#1 SMP PREEMPT Fri Feb 26 15:09:29 CET 2016
C Library	GNU C Library version 2.23 (stable)
Default C Compiler	GNU C Compiler version 5.3.0 (GCC)
Distribution	Arch Linux

Wnioski:
- algortm dla macierzy trójdiagonalnych pozwala na znaczną poprawę czasu obliczeń (z rzędu sekund na rząd mikrosekund) w porównaniu do dekompozycji LU