Obliczenia Naukowe

Lista nr 5

Eryk Krupa
244993

1 Problem

Rozwiązanie układu równań liniowych:

$$Ax = b$$

dla danej macierzy $A \in R^{n\times n}$ i wektora prawych stron $b \in R^n$, gdzie $n \geqslant 4$.

Macierz A jest rzadką macierzą blokową o następującej strukturze:

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

$v = \frac{n}{l}$, zakładając że n jest podzielne przez l, gdzie $l \geqslant 2$ jest rozmiarem wszystkich kwadratowych macierzy wewnętrznych (bloków) A_i, B_i, C_i, 0.

Macierze A_i, B_i, C_i, 0 są następującej postaci:

(a) $A_i \in^{l\times l}$, $i = 1, \ldots, v$ – macierze gęste,

(b) $0 \in^{l\times l}$ – macierz zerowa,

(c) $B_i \in^{l\times l}$, $i = 2, \ldots, v$ – macierze z niezerowymi dwoma ostatnimi kolumnami:

$$B_i = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & b^i_{1\,l-1} & b^i_{1\,l} \\ 0 & \cdots & 0 & b^i_{2\,l-1} & b^i_{2\,l} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & b^i_{l\,l-1} & b^i_{l\,l} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

(d) $C_i \in^{l\times l}$, $i = 1, \ldots, v-1$ – macierze diagonalne:

$$C_i = \begin{pmatrix} c^i_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & c^i_2 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & c^i_{l-1} & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & c^i_l \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Układ $Ax = b$ należało rozwiązać stosując dwie różne metody:

(a) metodę eliminacji Gaussa bez wyboru elementu głównego oraz z częściowym wyborem elementu głównego,

(b) metodę eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego,

2 Macierz

Macierz A dana w zadaniu posiada tylko $(l+3)n-3l$ elementów nie będących zerami. Jest to suma elementów w blokach A_i: $v \cdot l^2$, B_i: $(v-1) \cdot 2l$ oraz C_i: $(v-1) \cdot l$. Oznacza to, że A jest macierzą rzadką. By nie marnować pamięci przechowując macierz w tablicy dwuwymiarowej $n \times n$, użyta została specjalna struktura do przechowywania macierzy rzadkich `SparseMatrixCSC`, w której macierze przechowywane są w skompresowanym porządku kolumnowym.

3 Metoda Eliminacji Gaussa

3.1 Podstawy algorytmu

Zasadą działania metody eliminacji Gaussa przy rozwiązywaniu układów równań jest stopniowa eliminacja niewiadomych przez odpowiednie kombinowanie równań tak, aby zastąpić dany układ $Ax = b$ równoważnym mu układem z macierzą trójkątną górną.

W pierwszym kroku zostaje wyeliminowana niewiadoma x_1 z $n-1$ równań poprzez odejmowanie dla $i = 2, \cdots, n$ odpowiedniej krotności pierwszego równania od i-tego równania, aby wyzerować w nim współczynnik przy x_1. Takie postępowanie powtarzane jest dla kolejnych niewiadomych x_k, gdzie dla $i = k+1, \cdots, n$ od i-tego równania odejmowana jest odpowiednia krotność k-tego równania.

Aby możliwe było wykonanie powyższej procedury każdy z elementów diagonalnych w macierzy musi być różny od zera. W momencie kiedy tak nie jest potrzebna jest modyfikacja algorytmu, a mianowicie zamiana wiersza z zerowym elementem na diagonali z innym który w tym miejscu nie posiada zera, w praktyce w i-tym kroku algorytmu wyszukuje się w i-tej kolumnie element (zwany *elementem głównym*) o największej co do modułu wartości i wiersz z takim elementem zamienia się miejscem z i-tym wierszem. Taka zamiana zawsze jest możliwa, gdyż w przeciwnym przypadku macierz byłaby osobliwa.

Ostatnim krokiem jest rozwiązanie powstałego układu z macierzą trójkątną górna za pomocą *algorytmu podstawiania wstecz*. Polega on na obliczeniu: $\mathrm{x}_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}}{a_{ii}}$ dla wierszy i od n do 1.

Metoda eliminacji Gaussa ma złożoność $O(n^3)$, a algorytm podstawiania wstecz $O(n^2)$. Zatem, aby rozwiązać układ równań, trzeba wykonać łącznie $O(n^3)$ operacji.

3.2 Modyfikacje

Macierz A jest macierzą rzadką posiadającą specyficzną postać, co umożliwia zredukowanie w znacznym stopniu liczby wykonywanych operacji w stosunku do metody eliminacji Gaussa stosowanej dla macierzy gęstych. Postać macierzy A zapewnia, że wiele elementów znajdujących się pod diagonalą będzie zerami i nie będzie konieczne ich zerowanie.

Rozpatrując pierwszych $l-2$ kolumn widać że elementy niezerowe mogą znajdować się jedynie w bloku A_1, a więc tylko w l pierwszych rzędach. Idąc dalej, dla kolejnych l kolumn wszystkie niezerowe elementy będą znajdować się najniżej w bloku B_3 albo w bloku A_3 – czyli $2l$ pierwszych rzędach, a dla jeszcze następnych l kolumn w blokach B_4 i A_4 – czyli $3l$ pierwszych rzędach. Biorąc pod uwagę następne kolumny schemat będzie się powtarzał dając możliwość wyprowadzenia ogólnego wzoru na indeks ostatniego niezerowego elementu $e_{non\ 0}$ w danej kolumnie k:

$$e_{non\ 0}(k) = \min\left\{ l + l \cdot \left\lfloor \frac{k+1}{l} \right\rfloor, n \right\} \tag{4}$$

Również, poza ostatnimi l wierszami, w każdym wierszu ostatnim niezerowym elementem jest element leżący na diagonali bloku C_i. Można zauważyć, że owe elementy znajdują się zawsze w odległości l od elementów na diagonali macierzy A. Natomiast dla ostatnich l rzędów najbardziej wysunięte na prawo elementy niezerowe leżą w n-tej kolumnie. Powyższa obserwacja pozwala na wyprowadzenie wzoru tym razem na indeks kolumny k_{last}, w której znajduje się ostatni niezerowy element w rzędzie r:

$$k_{last}(r) = \min\{r + l, n\}. \tag{5}$$

Oczywiście, jeżeli w danym kroku metody eliminacji Gaussa r-ty rząd odejmowany jest od rzędów pod nim, nie jest konieczne modyfikowanie elementów w kolumnach o większych od $k_{last}(r)$ indeksach.Metoda eliminacji Gaussa prowadzi do układu z macierzą trójkątną górną, który rozwiązywany jest za pomocą algorytmu podstawiania wstecz, który w tym przypadku także poddawany jest drobnym modyfikacjom w celu ograniczenia liczby wykonywanych operacji.Warto zauważyć tutaj, że w wyniku eliminacji Gaussa poza elementami pod diagonalą bloków C_i w macierzy A nie powstały żadne nowe elementy niezerowe. Wystarczy zatem dla każdego wiersza sumować elementy tylko do pewnej kolumny.

Metodę eliminacji Gaussa z opisanymi modyfikacjami przedstawia algorytm 1.

Zakładając, że l jest stałą, złożoność obliczeniowa zmodyfikowanej metody eliminacji Gaussa, wynosi $O(n)$. Zewnętrzna pętla eliminacji Gaussa wykonuje $n-1$ przebiegów, środkowa maksymalnie $2l$, natomiast wewnętrzna maksymalnie l. Z kolei w algorytmie podstawiania wstecz zewnętrzna pętla wykonuje n przebiegów, natomiast wewnętrzna maksymalnie l. Jest to znacząca poprawa względem standardowej metody eliminacji Gaussa.

Przedstawiono wariant metody eliminacji Gaussa bez wyboru elementu głównego, czasami jednak lepiej sprawdza się algorytm z tzw. częściowym wyborem (umożliwia rozwiązanie układu kiedy na diagonali macierzy pojawiają się elementy zerowe), w tym wypadku oznacza to wybranie wiersza, dla którego element w eliminowanej kolumnie i ma największą wartość bezwzględną i zamienienie go z i-tym wierszem (po zamianie eliminacja jest kontynuowana w zwykły sposób).

W praktyce taka zamiana wierszy bywa kosztowna, szczególnie kiedy operacje wykonywane są na dużych macierzach, dlatego przy metodzie eliminacji Gaussa z wyborem elementu głównego pierwszą wprowadzoną zmianą jest stworzenie wektora permutacji wierszy (p), w którym pamiętane jest na jakiej aktualnie pozycji w macierzy znajduje się dany wiersz.

Wybór elementu głównego sprawia również, że niemożliwe jest zachowanie wyliczonych wartości k_{last}, gdyż odejmowanie wierszy w innej kolejności, może doprowadzić do powstania nowych elementów niezerowych. Konieczne jest zatem nowe, szersze oszacowanie k_{last}. Zauważyć można, że w czasie eli-

Algorithm 1: Eliminacja Gaussa

Dane wejściowe:

A – dana w zadaniu macierz,
b – wektor prawych stron,
n – rozmiar macierzy A,
l – rozmiar bloku macierzy A.

Dane wyjściowe:

X – wektor zawierający rozwiązania układu $Ax = b$.

```
function eliminacja_gaussa_bez_elementu_glownego(A, , n, l)
    for k ← 1 to n − 1 do
        e_non_0 ← min( l + l · ⌊(k+1)/l⌋ , n );
        k_last ← min(k + l, n);
        for i ← k + 1 to e_non_0 do
            if A[k][k] = 0 then
                error znaleziono zero na przekątnej
            end
            z ← A[i][k]/A[k][k];
            A[i][k] ← 0 ;
            for j ← k + 1 to k_last do
                A[i][j] ← A[i][j] − z · A[k][j];
            end
            b[i] ← b[i] − z · b[k];
        end
    end
    for i ← n downto 1 do
        k_last ← min(i + l, n);
        for j ← k + 1 to k_last do
            suma ← suma + x[i] · A[i][j];
        end
        x[i] ← (b[i] − suma)/A[i][i];
    end
    return ;
```

minowania współczynników z $l-2$ pierwszych kolumn najdalszy niezerowy element można stworzyć w kolumnie z indeksem $2l$ – poprzez odejmowanie l-tego wiersza, który w tej kolumnie posiada niezerowy element. Podczas eliminowania współczynników z kolejnych l kolumn najdalszy niezerowy element można stworzyć w kolumnie z indeksem $3l$, analogicznie poprzez odejmowanie $2l$-tego wiersza, który w tej kolumnie posiada niezerowy element. Stosowanie powyższego rozumowania dla dalszych kolumn prowadzi do uzyskania nowego wzoru na k_{last}, mianowicie:

$$k_{last}(k) = \min\left\{2l + l \cdot \left\lfloor \frac{k+1}{l} \right\rfloor, n\right\}. \tag{6}$$

Podobne ograniczenie zastosowane jest również podczas wykonywania algorytmu podstawiania wstecz – nie powstają żadne nowe elementy niezerowe poza tymi już uwzględnionymi, jedyną zmianą jest uwzględnienie permutacji wiersza, co jednak w zasadzie nie wpływa na szacowaną wartość.

Metodę eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego przedstawia algorytm 2.

Złożoność obliczeniowa zmodyfikowanej metody eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego jest gorsza niż bez wyboru elementu głównego z powodu zastosowanych szerszych ograniczeń na k_{last}, jednak przy założeniu, że l jest stałą nie wpływa to na ogólną złożoność $O(n)$.

3.3 Wyniki

Zestawienie czasu rozwiązywania, zużytej pamięci oraz powstałych błędów dla układów równań macierzy A różnej wielkości oraz $l = 4$, policzonych metodą eliminacji Gaussa z dwoma modyfikacjami – bez wyboru elementu głównego i jego częściowym wyborem.

Macierz	Bez elementu głównego			Z elementem głównym		
n	Czas [s]	Pamięć [MiB]	Błąd	Czas [s]	Pamięć [MiB]	Błąd
100000	0.24155	5,675	2.7428e-14	0.41653	6,032	2.4141e-16
200000	0.46143	12,484	2.8241e-14	0.82432	14,946	2.4487e-16
400000	0.84321	22,504	2.8612e-14	1.73954	26,832	2.4293e-16
600000	1.42645	31,932	2.8832e-14	2.60243	37,983	2.4402e-16
800000	1.82143	39,027	2.8938e-14	3.82341	47,212	2.4382e-16

Algorithm 2: Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

Dane wejściowe:

A – dana w zadaniu macierz,
b – wektor prawych stron.
n – rozmiar macierzy A,
l – rozmiar bloku macierzy A.

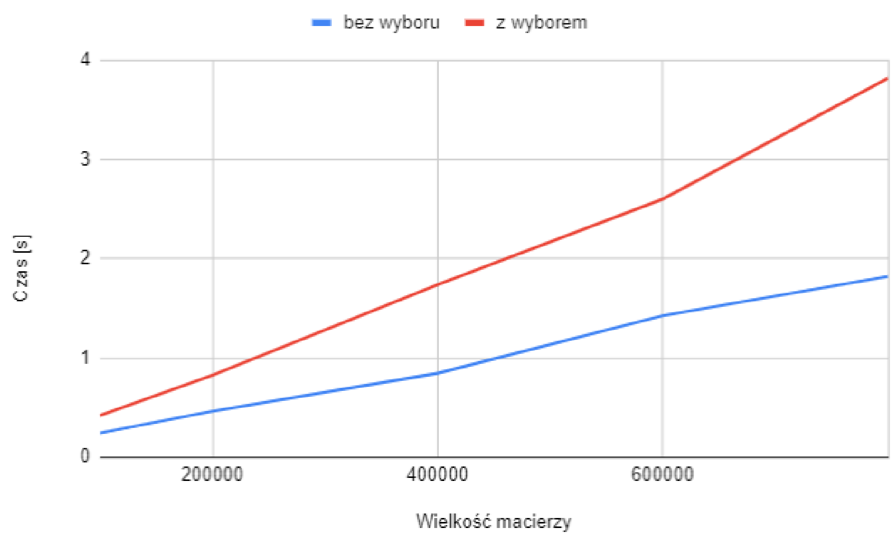
Dane wyjściowe:

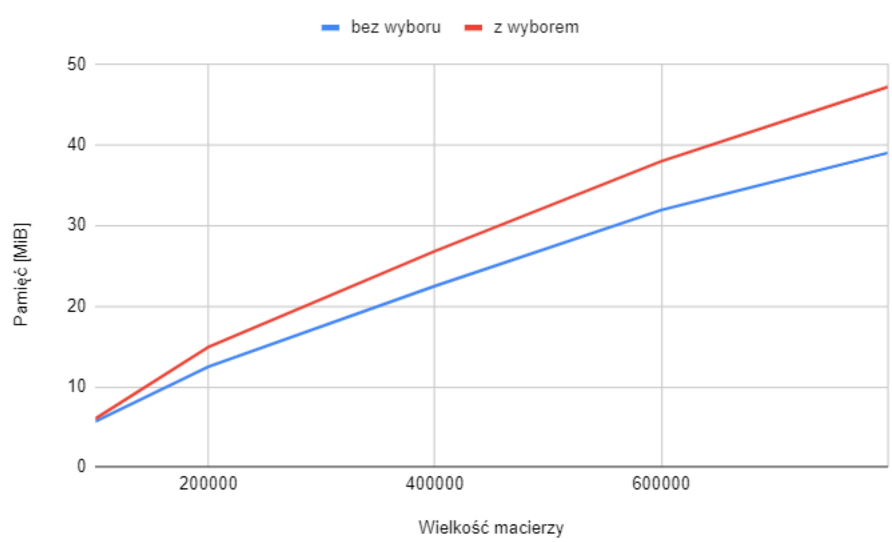
x — wektor zawierający rozwiązania układu $Ax = b$.

function `eliminacja_gaussa_z_elementem_głownym`(A, , n, l)

- p $\leftarrow \{$i : i $\in \{1, \ldots, n\}\}$;
- **for** k $\leftarrow 1$ **to** $n - 1$ **do**
  - $e_{non\ 0} \leftarrow \min\left(l + l \cdot \left\lfloor \frac{\mathsf{k}+1}{l} \right\rfloor, n\right)$;
  - $k_{last} \leftarrow \min\left(2l + l \cdot \left\lfloor \frac{\mathsf{k}+1}{l} \right\rfloor, n\right)$;
  - **for** i $\leftarrow$ k $+ 1$ **to** $e_{non\ 0}$ **do**
    - $r_{\max} \leftarrow$ m takie, że:
      A[p[m]][k] $= \max(|A$[p[q]][k]$|$: q $\in \{$i$, \ldots, e_{non\ 0}\})$;
    - **if** p[$r_{\max}$] $= 0$ **then**
      - **error** macierz osobliwa
    - **end**
    - swap (p[k], p[$r_{\max}$]);
    - z $\leftarrow A$[p[i]][k]$/A$[p[k]][k];
    - A[p[i]][k] $\leftarrow 0$;
    - **for** j $\leftarrow$ k $+ 1$ **to** k_{last} **do**
      - A[p[i]][j] $\leftarrow A$[p[i]][j] $-$ z $\cdot A$[p[k]][j];
    - **end**
    - b[p[i]] $\leftarrow b$[p[i]] $-$ z $\cdot b$[p[k]];
  - **end**
- **end**
- **for** i $\leftarrow n$ **downto** 1 **do**
  - $k_{last} \leftarrow \min\left(2l + l \cdot \left\lfloor \frac{\mathsf{p[i]}+1}{l} \right\rfloor, n\right)$;
  - **for** j $\leftarrow$ k $+ 1$ **to** k_{last} **do**
    - suma $\leftarrow$ suma $+$ [j] $\cdot A$[p[i]][j];
  - **end**
  - x[i] $\leftarrow (b$[p[i]] $-$ suma$)/A$[p[i]][i];
- **end**
- **return** ;

Można zauważyć, że błędy dla metody eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego są o rzędy wielkości mniejsze od tych dla metody bez wyboru elementu głównego. Poniżej zaprezentowano dane z tabeli w formie wykresu.





3.4 Wnioski

Wyniki sugerują, że złożoność obliczeniowa zaimplementowanych metod jest liniowa. Co istotne, metoda z wyborem elementu głównego jest wolniejsza i zużywa więcej pamięci niż metoda bez jego wyboru, jednakże daje dokładniejsze wyniki. Warto również wspomnieć, że w przypadku elementów zerowych na diagonali użycie metody z wyborem elementu głównego może być konieczne do rozwiązania układu.