Obliczenia naukowe 5

Gabriel Wechta 250111

11 stycznia 2021

1 Wstęp

Lista 5 skupia się na zagadnieniu numerycznego rozwiązywania układów równań liniowych. Naturalną strukturą ułatwiającą opis rozwiązywania równań liniowych oraz umożliwiającym zapis w pamięci komputera są macierze. Wtedy zagadnienie sprowadza się do wyznaczenia x w równaniu:

$$Ax = b,$$

gdzie $A \in R^{n \times n}$, $x, b \in R^n$.

1.1 Rzadka macierz blokowa

Macierz nazywamy rzadką gdy ma *dużo* elementów zerowych. Jest to istotny rodzaj macierzy z punktu widzenia obliczeń numerycznych ponieważ, ze względu na dużą liczbę **0**, nie biorących udziału w obliczeniach, taką macierz można efektywniej zapisywać w pamięci niż za pomocą tablicy tablic, więcej o tym poniżej.
Macierz nazywamy blokową gdy można wydzielić w niej bloki, podmacierze różnych rozmiarów zachowujące wspólne własności. Macierz przedstawiona w zadaniu jest postaci:

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

gdzie:

1. l - rozmiar bloków.
2. $v = n/l$ - liczba bloków.
3. $A_k \in R^{l \times l}$ - macierz gęsta.
4. $B_k \in R^{l \times l}$ - macierz, której wyłacznie ostatnia kolumna jest niezerowa.
5. $C_k \in R^{l \times l}$ - macierz diagonalna.
6. 0 - blok samych zer.

1.2 Cel zadania

Celem zadania jest rozwiązanie równania $Ax = b$ korzystając z zoptymalizowanych algorytmów konkretnie pod wyżej opisaną macierz, tj. korzystając z wiedzy na temat struktury macierzy A. Należy podkręcić metodę eliminiacji Gaussa z wyborem elementu głównego i bez, wyznaczanie rozkładu **LU** macierzy A metodą eliminacji Gaussa z wyborem elementu głównego i bez oraz funckję obliczajacą x z wcześniej policzonego rozkładu **LU**.

2 Algorytmy

Idealna sytuacja dla problemu szukania rozwiązania układu równań $Ax = b$, to taka gdy A jest macierzą trójkątną. Znalezienie rozwiązania sprowadza się wtedy do wyliczenia kolejno $x_1, x_2, ..., x_n$ lub $x_n, x_{n-1}, ..., x_1$, korzystając z tego, że

$$x_i = (b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ji}x_i)/a_{ii} \tag{1}$$

lub odpowiednio

$$x_i = (b_i - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}x_i)/a_{ii} \tag{2}$$

2.1 Eliminacja Gaussa

Celem eliminacji Gaussa jest doprowadzenie macierzy do właśnie takiej postaci, a konkretniej do macierzy trójkątniej górnej, poprzez przeprowadzanie operacji elementarnych na wierszach i kolumnach macierzy. Eliminacja polega na przeprowadzaniu podobnej operacji do tej, której uczy się w szkole - "dodawanie stronami", po uprzednim przemnożeniu wiersza o mnożnik wyznaczony w taki sposób aby wyzerował jeszcze niezerową kolumnę macierzy, oczywiście należy zmienić również wartości wektora b, ponieważ wracając do analogii ze szkoły, mnożenie wiersza przez mnożnik należy wykonać "stronami". Innymi słowy mnożnik dla wiersza k jest równy ułamkowi $\frac{a_{ik}}{a_{kk}}$. Należy zwrócić uwagę, że w tym miejscu istnieje niebezpieczeństwo dzielenia przez 0, będzie miało to miejsce gdy $a_{kk} = 0$. Standardowym obejściem tego problemu jest zamiana wierszy miejscami lub eliminacja Gaussa z wyborem elementu głównego, o której poniżej.
Przy tak zmodyfikowanej macierzy trójkątnej pozostaje jedynie wyliczyć x korzystając z (2).

function `gauss(`A,b,n,l`)`
- `część przekształcająca macierz`
- **for** $k = 1$ **to** n **do**
  - **for** $i = k + 1$ **to** $k + (l - k) \mod l$ **do**
    - $m = \frac{A[i][k]}{A[k][k]}$
    - $A[i][k] = 0$
    - **for** $j = k + 1$ **to** $min\{k + l, n\}$ **do**
      - $A[i][j] = A[i][j] - A[k][j]$
    - **end**
    - $b[i] = b[i] - m \cdot b[k]$
  - **end**
- **end**
- `część obliczająca` x
- $x = [0.0, 0.0, ..., 0.0]$
- **for** $i = n$ **downto** 1 **do**
  - $s = 0$
  - **for** $j = i + 1$ **to** $min\{i + l, n\}$ **do**
    - $s = s + A[i][j] \cdot x[j]$
  - **end**
  - $x[i] = \frac{b[i]-s}{A[i][i]}$
- **end**
- **return** x

Algorytm 1: Gauss.

2.2 Eliminacja Gaussa z wyborem elementu głównego

Wyżej wspomniane niebezpieczeństwo dzielenia przez 0 nie jest jedynym niebezpieczeństwem związanym z eliminacją Gaussa. Niebezpieczeństwo staje się jeszcze poważniejsze gdy przeanalizujemy co się dzieje, gdy dzielimy przez ϵ bliski zeru. Ze względu na to jak wykonywane jest dzielenie na liczbach zmiennoprzecinkowych, mogą być generowane olbrzymie błędy. Niebezpieczeństwo jest większe ponieważ zamiast otrzymać

spodziewaną informację o wyjątku dzielenie przez zero, otrzymamy wynik, który może być bardzo daleki od prawdy. Drugi przypadek nie zapewnia stabilności numerycznej algorytmowi eliminacji Gaussa. Aby rozwiązać ten problem algorytm rozszerza się o wybór elementu głównego.
Wybór elementu głównego oznacza wybranie w analizowanej kolumnie największego co do wartości bezwzględnej elementu i przestawieniu wierszy macierzy oraz wektora b, tak aby największy element znalazł się na diagonalii i dopiero wtedy przeprowadzenie eliminacji Gaussa. Przestawienie opisane powyżej jest realizowane komputerowo poprzez tablicę permtuacji, w której zapisywana jest kolejność przestawień.

function `gauss_choosing_main_element(`A,b,n,l`)`
- $p = \{1, 2, ..., n\}$
- `część przekształcająca macierz`
- **for** $k = 1$ **to** n **do**
  - $r = k$
  - $e =$abs$(A[k][k])$
  - **for** $i = k + 1$ **to** $k + (l - k) \mod l$ **do**
    - **if** $abs(A[k][p[i]]) > e$ **then**
      - $r = i$
      - $e =$abs$(A[k][p[i]])$
    - **end**
  - **end**
  - $p[k] \Longleftrightarrow p[r]$
  - **for** $i = k + 1$ **to** $k + (l - k) \mod l$ **do**
    - $m = \frac{A[p[i]][k]}{A[p[k]][k]}$
    - $A[p[i]][k] = 0$
    - **for** $j = k + 1$ **to** $min\{k + 2l, n\}$ **do**
      - $A[p[i]][j] = A[p[i]][j] - A[p[k]][j]$
    - **end**
    - $b[p[i]] = b[p[i]] - m \cdot b[p[k]]$
  - **end**
- **end**
- `część obliczająca` x
- **for** $i = n$ **downto** 1 **do**
  - $s = 0$
  - **for** $j = i + 1$ **to** $min\{i + l, n\}$ **do**
    - $s = s + A[p[i]][j] \cdot x[j]$
  - **end**
  - $x[i] = \frac{b[p[i]]-s}{A[p[i]][i]}$
- **end**
- **return** x, p

Algorytm 2: Gauss z częściowym wyborem elementu głównego.

2.3 Rozkład LU

Rozkład LU jest kolejnym sposobem przedstawienia macierzy A w sposób przyjaźniejszy metodom numerycznym. Pomysł jest taki, aby A zapisać jako iloczyn macierzy L - trójkątnej dolnej i U - trójkątnej górnej, tj:

$$A = LU \tag{3}$$

wtedy rozwiązanie $Ax = b$ dzieli się dwa etapy:

1. rozwiązanie $Lz = b$, względem z,
2. rozwiązanie $Ux = z$, względem x.

Obliczenie każdego z etapów jest łatwe ze wzlędu na to, że są to macierze trójkątne.
Wyznaczenie rozkładu $A = LU$ tak aby był jednoznaczny wymaga zapisania diagonali jednej z macierzy

1-kami.
Algorytm obliczenia LU jest taki sam jak wcześniejsza eliminacja Gaussa lub odpowiednio eliminacja Gaussa z wyborem elementu głównego z tą różnicą, że zamiast podstawiać 0 w miejsce eliminowanego elementu podstawiany jest mnożnik (w algorytmach m). Poniżej znajduje się pseudokod algorytmu obliczającego x przy użyciu rozkładu LU.

function `lu(`A,p,b,n,l`)`
- $y = [0.0, 0.0, ..., 0.0]$
- **for** $i = 1$ **to** n **do**
  - $s = 0$
  - **for** $j = max(l \cdot \lfloor \frac{i-1}{l} \rfloor, 1)$ **to** $i - 1$ **do**
    - $s = s + A[p[i]][j] \cdot y[j]$
  - **end**
  - $y[i] = b[p[i]] - s$
- **end**
- $x = [0.0, 0.0, ..., 0.0]$
- **for** $i = n$ **downto** 1 **do**
  - $s = 0$
  - **for** $j = i + 1$ **to** $min\{i + l, n\}$ **do**
    - $s = s + A[p[i]][j] \cdot x[j]$
  - **end**
  - $x[i] = \frac{y[i]-s}{A[p[i]][i]}$
- **end**
- **return** x

Algorytm 3: Rozwiązanie równań przy użyciu rozkładu LU.

Aby otrzymać algorytm na wyliczenie x z LU bez wyboru elementu głównego, w powyższym pseudokodzie należy zamienić każde $p[i]$ na i oraz nie przekazywać p do funkcji.

3 Optymalizacja

Analizując charakterystyczną postać macierzy A można dojść do wniosku, że w celu otrzymania macierzy górnotrójkątnej nie trzeba brać pod uwagę elementów znajdujących się pod przekątną w pewnej odległości zależnej od analizowanej kolumny, gdyż są tam już zera, czyli wartości jakie chcemy, żeby tam były. Liczba elementów do usunięcia w kolumnie k, w bloku rozmiaru l jest równa:

$$(l - k) \mod l \tag{4}$$

Tym samym nie trzeba iterować po wszystkich elementach kolumny, a wystarczy po kilku pierwszych poniżej elementu przekątniowego. Powyższa eliminacja została już użyta we wcześniejszych pseudokodach algorytmów.

W celu zaoszczędzenia miejsca i czasu wykonywania, w programach zamiast tablicy tablic wykorzystywana jest `SparseMatrixCSC` - strukura z pakietu `SparseArrays` w `Julii`. Taki sposób pamiętania macierzy zajmuje mniej miejsca i wymaga mniej czasu aby dostać się do elementu niż tablica tablic. Nie jest to jednak rozwiązanie idealne, ponieważ dostęp do elementu nie jest w czasie liniowym, niemniej w analizie złożoności założę, że tak jest.

4 Złożoność

4.1 Eliminacja Gaussa

Zauważmy, że pętla z iteratorem k wykona się n razy, a pozostałe dwie pętle wewnętrzne co najwyżej l razy. Daje to złożoność $O(n \cdot l^2)$. Zatem jest to złożoność liniowa.

4.2 Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

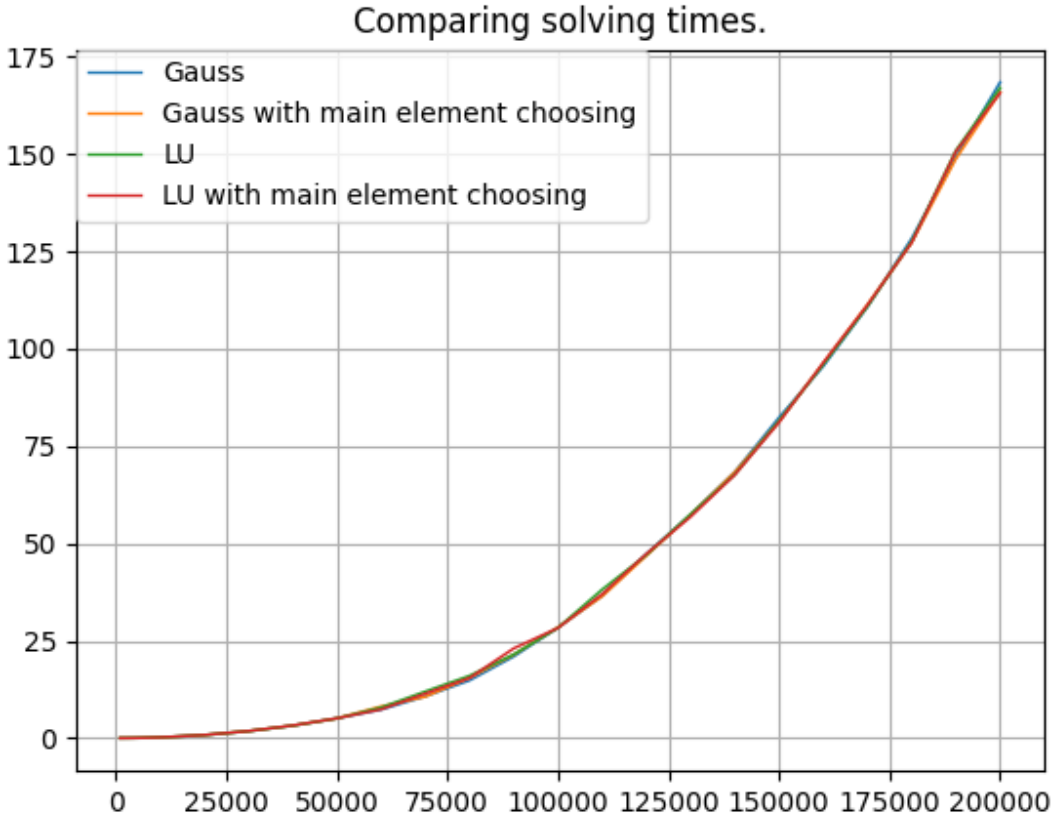
Podobnie jak algorytm eliminacji Gaussa, złożoność eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego również będzie $O(n)$ z tą różnicą, że pierwsza, dodatkowa pętla, której iteratorem jest i wykona się co najwyżej l razy.

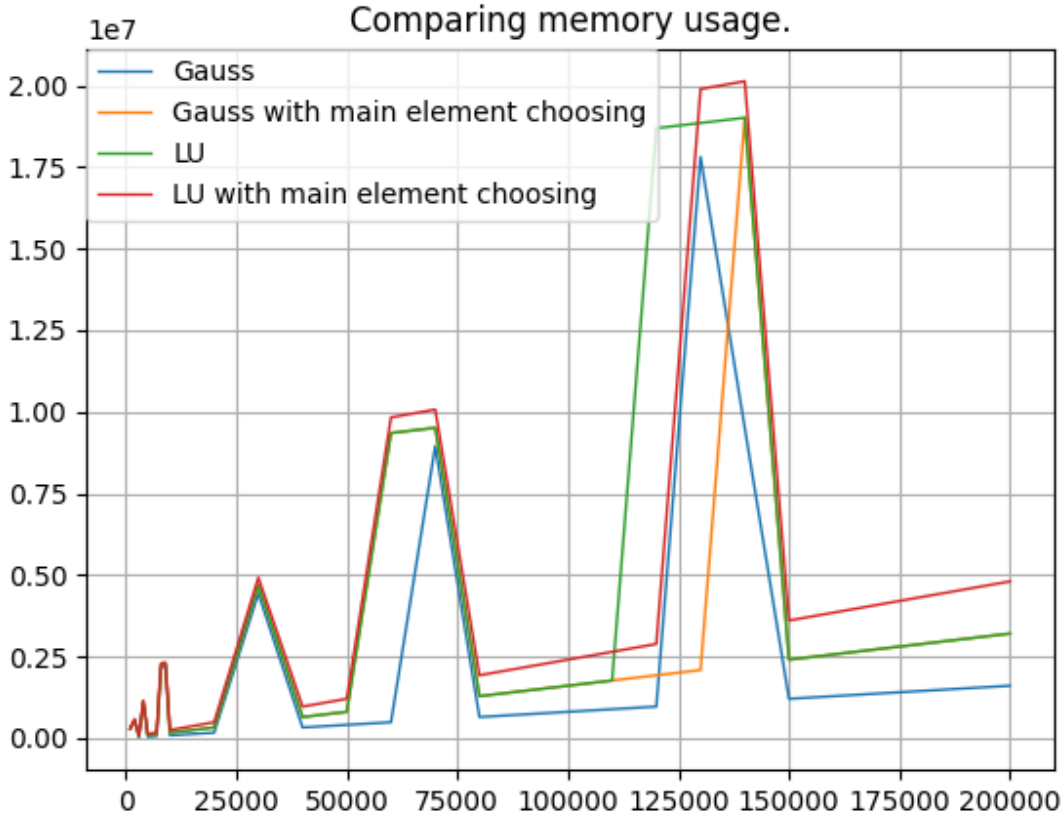
4.3 Rozkład LU

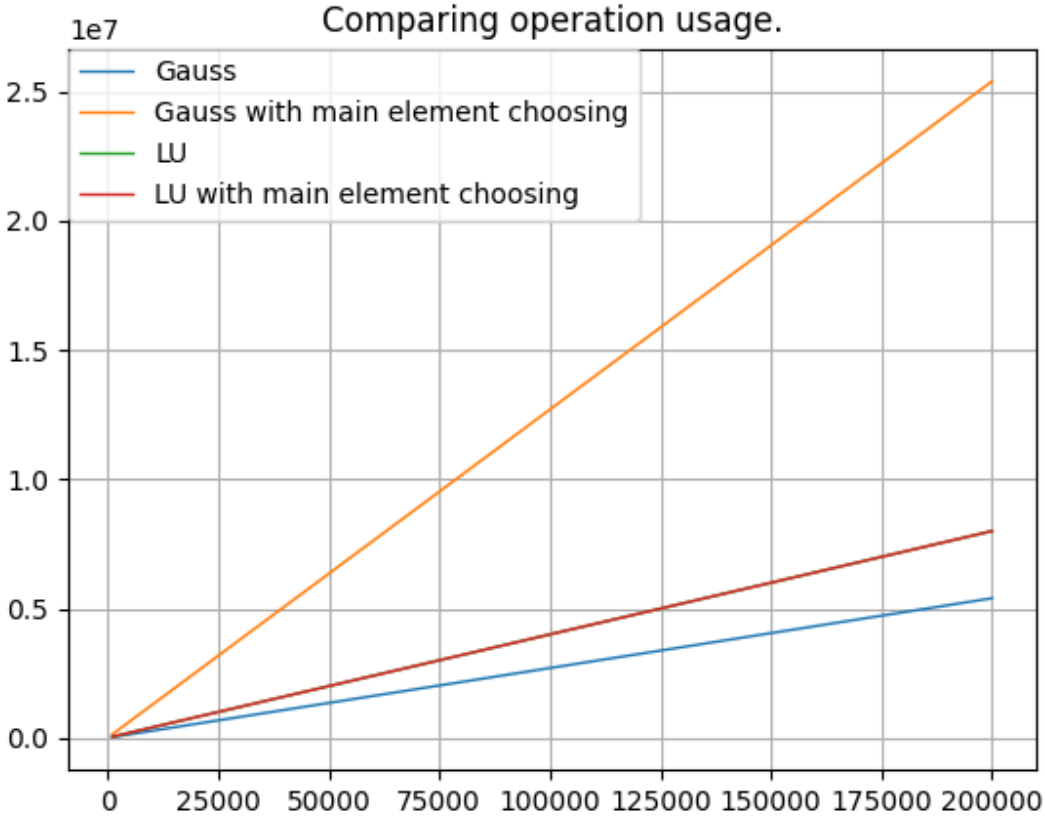
Główna pętla programu wykona się n razy, wewnętrzna zaś maksymalnie $i - 1$ co również prowadzi do złożoności $O(n)$.

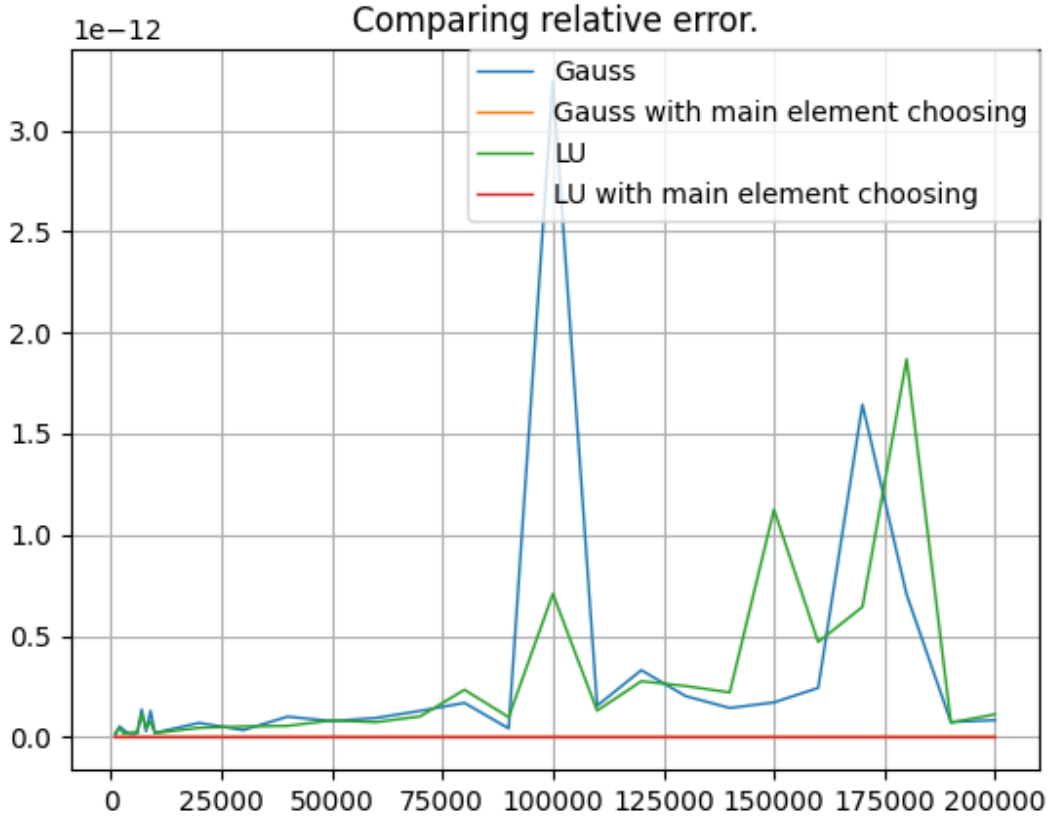
5 Wyniki

Poniższe wykresy pokazują wyniki przeprowadzone dla zaimplementowanych w pliku `blocksys.jl` programów. Do zebrania danych zostało użyte makro `Julii @timed`, które zwraca informacje o czasie i wykorzystanej pamięci. Testy zostałe przeprowadzone na macierzach wygenerowanych przez funkcję `blockmat` z parametrami: uwarunkowanie = 1.0, l = 5 i rozmiarach od 1000 do 200000 z gęstem próbkowaniem.




Comparing memory usage.
1e7
Gauss
Gauss with main element choosing
LU
LU with main element choosing
2.00
1.75
1.50
1.25
1.00
0.75
0.50
0.25
0.00
0
25000
50000
75000
100000
125000
150000
175000
200000


Comparing operation usage.
1e7
Gauss
Gauss with main element choosing
LU
LU with main element choosing
2.5
2.0
1.5
1.0
0.5
0.0
0
25000
50000
75000
100000
125000
150000
175000
200000



6 Obserwacje i wnioski

Rzeczywisty czas potrzebny na obliczenie x jest podobny dla wszystkich programów, ponadto jest kwadratowo zależny od rozmiaru macierzy. Taki stan rzeczy jest spowodowany tym, że dostęp do komórki pamięci przy użyciu `SparseMatrixCSC` nie jest tak naprawdę liniowy a bliższy logarytmowi.
Jeżeli chodzi o pamięć można zauważyć nietypowe zachowanie, mianowicie ogromne skoki w użyciu pamięci i potem nagłe spadki, jest to również spowodowane sposobem pamiętania w pamięci komputera obiektów `SparseMatrixCSC`. Należy zwrócić uwagę również na to, że czysty algorytm eliminacji Gaussa zużywa najmniej pamięci a wcale nie oddstaje czasowo od innych.
Złożoność obliczeniowa z kolei rośnie liniowo dla wszystkich metoda. Należy zwrócić szczególną uwagę na algorytm eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego, który zwiększa liczbę operacji prawie pięciokronie w porównaniu do zwykłego algorytmu eliminacji Gaussa.
Pozostaje jeszcze kwestia błędu względnego. Liczę go w następujący sposób $\delta = \frac{||I-x||}{||x||}$, gdzie:

1. I - wektor 1.0 typu Float64.
2. $||||$ - norma wektora z pakietu `LinearAlgebra`.

Zgodnie z oczekiwaniami, o których pisałem wcześniej metody używające rozkładu LU dają dużo mniejsze błędy. Największe błędy generuje metoda Gaussa, zwłaszcza dla $n = 100000$. Nie porównując jednak metod, ogólnie udało się uzyskac bardzo dobre wyniki, przybliżenie obarczone błędem rzędu 10^{-12} jest dobrym przybliżeniem.
Lista 5 pokazała, że nieznaczna modyfikacja, dokręcenie algorytmu pod konkretny problem może doprowadzić do znacząco lepszych wyników oraz nauczyła wiele o tym jak zaprząc komputer do rozwiązywania ogromnych układów równań liniowych.