Cómputo Científico Tarea 1 Descomposición LU y Cholesky

Iván Irving Rosas Domínguez

22 de diciembre de 2023

1. Implementar los algoritmos de Backward y Forward substitution.

Solución: La implementación de los algoritmos anteriores se puede apreciar en el script 'Algoritmos'. Las funciones de los respectivos algoritmos son llamadas a través de los nombres forsub(M, a) y backsub(M, a), donde M y a son las respectivas matrices y vectores que forman los sistemas triangulares que los algoritmos van a resolver. Los comentarios sobre el funcionamiento del algoritmo se encuentran en este archivo.

2. Implementar el algoritmo de eliminación gaussiana con pivoteo parcial LUP, 21.1 del Trefethen (p.160).

Solución: La implementación de este algoritmo se aprecia nuevamente en el script 'Algoritmos'. La función que implementa dicho algoritmo tiene el nombre de LUPfact(A), donde A es la matriz a descomponer. También se encuentran aquí los comentarios sobre el funcionamiento del algoritmo.

3. Dar la descomposición LUP para una matriz aleatoria de entradas U(0,1) de tamaño 5×5 , y para la matriz

Solución: Este ejercicio se encuentra realizado en la primera parte del script 'Ejercicio 2-3'. En tal script se detalla el funcionamiento del código en sí de ambos ejercicios

Para la solución de estos ejercicios, se cargan primero las librerías a utilizar, que son numpy y de la librería scipy.stats se importa uniform. También se cargan las funciones a utilizar, a saber, las funciones LUPfact, backsub y forsub, de los respectivos algoritmos que implementan.

■ Lo primero que se realiza en el script es la descomposición LUP de una matriz con entradas aleatorias uniformes en (0,1) y de tamaño 5×5 . Para ello, y con la finalidad de poder repetir el experimento, se coloca primero una semilla para generar los números aleatorios. La elección de la semilla n es n = 10.

Generada la semilla, procedemos a extraer una muestra aleatoria de tamaño 25 de la distribución uniforme en (0,1), las cuales se guardan en un vector M de tamaño 25, y posteriormente se reorganiza dicho vector en un arreglo 2-dimensional de numpy, obteniendo así la matriz buscada. Se presenta en el script la posibilidad de visualizar de antemano dicha matriz generada.

Posteriormente se realiza la descomposición LUP aplicando la función LUPfact a nuestra matriz M. En el paso anterior, se extraen las matrices que la función LUPfact(M) genera (ver comentarios respectivos del script 'Algoritmos'), para una visualización lo más cercana posible a la forma

$$PA = LU$$

de la descomposición, donde PM es la matriz de permutación, A es la matriz original (en este caso A = M) y LM, UM son las matrices triangulares inferiores y superiores respectivamente que descomponen el producto de la izquierda. Obtenemos así la siguiente descomposición:

```
>>> PM,M,LM,UM=LUPfact(M)[0:4]
>>> PM
array([
           1., 0., 0., 0.],
                0.,
>>> M
array([[0.77132064, 0.02075195, 0.63364823, 0.74880388, 0.49850701]
        0.22479665, 0.19806286, 0.76053071, 0.16911084, 0.08833981
       0.68535982, 0.95339335, 0.00394827, 0.51219226, 0.81262096
        0.61252607, 0.72175532, 0.29187607, 0.91777412, 0.71457578
         .54254437,
                    0.14217005,
                                0.37334076, 0.67413362,
        0.88855371,
                                                        0.
       [0.29144383, 0.20537354,
                                            0.
                                                        0.
       0.79412638, 0.75434252, 0.30465516,
       0.70339666, 0.13644862, 0.00567659, 0.37929807, 1.
>>> UM
                                   0.63364823,
                      0.02075195,
array([
                                                0.74880388,
                                                -0.1531602 ,
                      0.93495412,
                                   -0.55908222,
         0.
                                   0.69067854,
                                                -0.01766838,
                                                0.44404723,
                                                              0.08031867
```

Figura 1: Descomposición LUP de la matriz aleatoria M.

■ Para el segundo ejemplo en donde se debe descomponer la matriz A dada al inicio de este ejercicio, procedemos simplemente ejecutando el algoritmo LUP en la consola para obtener la factorización. Nuevamente obtenemos las matrices de tal forma que recuperemos lo más posible la forma PA = LU. El resultado se muestra a continuación:

Figura 2: Descomposición LUP de la matriz A anterior.

4. Usando la descomposición LUP anterior, resolver el sistema de la forma

$$Dx = b$$

donde D son las matrices del problema 3, para 5 diferentes b aleatorios con entradas U(0,1). Verificando si es o no posible resolver el sistema.

Solución: Como se comentó en el ejercicio anterior, este ejercicio tiene el código implementado en el script 'Ejercicios 3-4'. Ya con las matrices M y A del ejercicio anterior, generamos cinco vectores aleatorios b para resolver los sistemas de ecuaciones Mx = b y Ax = b.

Para ello, como antes, sembramos una semilla para poder replicar los resultados. En este caso elegimos n=5. Creamos un arreglo de tamaño 25 con los números aleatorios uniformes en (0,1) y posteriormente formamos una matriz B de tamaño 5×5 . Pensaremos en cada columna de la matriz B como los respectivos 5 vectores b aleatorios.

Con los vectores b y las matrices M y A cargadas, junto con sus respectivas factorizaciones ya hechas, procedemos a implementar los algoritmos backward y forward, recordando que usando una matriz R y factorizándola con LU,

$$Rx = b \text{ y } PR = LU \implies LUx = Pb,$$

de tal forma que, haciendo Ux = y, tenemos que resolver los sistemas

$$Ly = Pb \ y \ Ux = y,$$

en ese orden, para obtener el vector x que sea solución del sistema Rx = b.

• Procedemos pues a solucionar los sistemas de ecuaciones para la matriz M primero, para cada uno de los cinco vectores b aleatorios. El resultado lo guardamos en una nueva matriz que llamamos XM (XA para la la matriz A), cuyos vectores columna sean los resultados de las soluciones de los 5 sistemas de ecuaciones. La razón de lo anterior es que podemos verificar si el sistema de ecuaciones en efecto fue resuelto simplemente realizando el producto de las matrices M, XM y verificando si en efecto dicho producto coincide con la matriz B.

Realizando lo anterior, obtenemos que en efecto el producto coincide, tal y como se muestra.

Figura 3: Verificación del producto $M \cdot XM$ con la matriz B. Ambos coinciden

■ Para el segundo ejemplo, replicamos exactamente el mismo procedimiento: colocamos una semilla, generamos la matriz B aleatoria (la semilla para este ejemplo es n = 15), y corremos el script, obteniendo la matriz XA solución, y notamos que el producto de las matrices A y XA, comparado con la matriz B, queda de la siguiente forma:

Figura 4: Verificación del producto $A \cdot XA$ con la matriz B. Ambos coinciden

5. Implementar el algoritmo de descomposición de Cholesky 23.1 del Trefethen (p.175).

Solución: La implementación de este algoritmo se encuentra nuevamente el script 'Algoritmos'. La función que implementa el algoritmo tiene el nombre de CholFact(A), donde A es la matriz hermitiana definida positiva que se va a descomponer, y los comentarios sobre el funcionamiento de este comentario se encuentran en su respectiva sección.

6. Comprara la complejidad de su implementación de los algoritmos de factorización de Cholesky y LUP mediante la medición de los tiempos que tardan con respecto a la descomposición de una matriz aleatoria hermitiana definida positiva. Graficar la comparación.

Solución: Para este ejercicio, primero cargamos en el script 'Ejercicio 5' todas las paqueterías a usar: numpy, time, scipy y matplotlib, junto con las funciones de los algoritmos LUP y Cholesky. Luego creamos una sucesión de matrices aleatorias con entradas de distribución uniforme en (0,1), y de tamaños entre 1 y 300, con una semilla n=5.

Posteriormente creamos matrices hermitianas definidas positivas reacomodando los vectores que se crean sucesivamente en arreglos cuadrados, y multiplicándo las matrices resultantes por su transpuesta, para que así, tengamos matrices simétricas y definidas positivas.

Creamos vectores de tiempos de ejecución de tamaño 300, uno para cada uno de los algoritmos. La idea es que en cada ciclo de ejecución de los algoritmos se mida el tiempo que tarda la computadora en ejecutar un algoritmo vs el tamaño de la matriz, y graficar los resultados.

Después de realizar tal labor y graficar con la librería matplotlib, obtenemos lo siguiente:

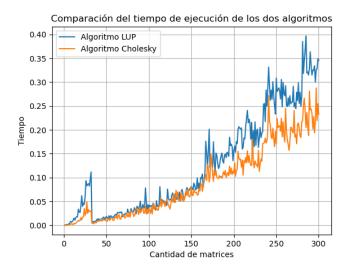


Figura 5: Comparación de los tiempos de ejecución. El algoritmo de Cholesky es más rápido.

Podemos apreciar de la gráfica que en efecto, como estaba previsto, las operaciones con el algoritmo de Cholesky se realian más rápido que con el algoritmo LUP, siguiendo un orden de $2/3m^3$ vs $1/3m^3$ respectivamente, tal y como esperábamos.

El ruido en la gráfica, recordemos, puede deberse a que la computadora no dedica toda su capacidad computacional a la ejecución de esta tarea.