

Miriam Jańczak

numer albumu: 229761

3 stycznia 2018

prowadzący: dr hab. Paweł Zieliński

OBLICZENIA NAUKOWE

Lista 5

Opis problemu

Rozwiązanie układu równań liniowych:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}, \quad (1)$$

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

Macierz \mathbf{A} jest rzadką macierzą blokową o następującej strukturze:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{C}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_2 & \mathbf{C}_2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 & \mathbf{A}_3 & \mathbf{C}_3 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{v-2} & \mathbf{A}_{v-2} & \mathbf{C}_{v-2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{v-1} & \mathbf{A}_{v-1} & \mathbf{C}_{v-1} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_v & \mathbf{A}_v \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$v = \frac{n}{\ell}$, zakładając że n jest podzielne przez ℓ , gdzie $\ell \geq 2$ jest rozmiarem wszystkich kwadratowych macierzy wewnętrznych (bloków) \mathbf{A}_i , \mathbf{B}_i , \mathbf{C}_i , $\mathbf{0}$.

Macierze \mathbf{A}_i , \mathbf{B}_i , \mathbf{C}_i , $\mathbf{0}$ są następującej postaci:

- (i) $\mathbf{A}_i \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$, $i = 1, \dots, v$ – macierze gęste,
- (ii) $\mathbf{0} \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$ – macierz zerowa,
- (iii) $\mathbf{B}_i \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$, $i = 2, \dots, v$ – macierze z niezerowymi dwoma ostatnimi kolumnami:

$$\mathbf{B}_i = \begin{pmatrix} 0 & \cdots & 0 & b_{1\ell-1}^i & b_{1\ell}^i \\ 0 & \cdots & 0 & b_{2\ell-1}^i & b_{2\ell}^i \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & b_{\ell\ell-1}^i & b_{\ell\ell}^i \end{pmatrix}, \quad (3)$$

- (iv) $\mathbf{C}_i \in \mathbb{R}^{\ell \times \ell}$, $i = 1, \dots, v-1$ – macierze diagonalne:

$$\mathbf{C}_i = \begin{pmatrix} c_1^i & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & c_2^i & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & c_{\ell-1}^i & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & c_\ell^i \end{pmatrix}. \quad (4)$$

W celu rozwiązania układu równań liniowych $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ (1) należało zastosować dwie metody:

- (a) metodę eliminacji Gaussa w wersji bez wyboru elementu głównego oraz z częściowym wyborem elementu głównego,
- (b) obliczyć rozkład \mathbf{LU} macierzy \mathbf{A} w wersji bez wyboru elementu głównego oraz z częściowym wyborem elementu głównego, a następnie rozwiązać układ $\mathbf{LUx} = \mathbf{b}$.

Sposób przechowywania macierzy

Macierz \mathbf{A} dana w zadaniu posiada tylko $(\ell+3)n-3\ell$ elementów nie będących zerami – $v \cdot \ell^2$ w blokach \mathbf{A}_i , $(v-1) \cdot 2\ell$ w blokach \mathbf{B}_i i $(v-1) \cdot \ell$ w blokach \mathbf{C}_i , co świadczy o tym, że \mathbf{A} jest macierzą rzadką. Przechowywanie macierzy \mathbf{A} w standardowy sposób (tablica dwuwymiarowa $n \times n$) byłoby więc dość nieefektywne. Aby temu zapobiec użyta została specjalna struktura do przechowywania macierzy rzadkich `SparseMatrixCSC` z języka `Julia`, w której macierze przechowywane są w skompresowanym porządku kolumnowym. W celu optymalizacji czasowej dostępu do elementów tak przechowywanej macierzy pod kątem zaimplementowanych algorytmów używano macierzy transponowanej, co jednak nie miało wpływu na ogólną ich postać, dlatego zostanie pominięte w rozważaniach.

Opis algorytmów

Metoda eliminacji Gaussa jest algorytmem mającym szerokie zastosowanie w rozwiązywaniu podstawowych problemów algebry liniowej takich jak rozwiązywanie układów równań liniowych, obliczanie rzędu macierzy, jej wyznacznika, macierzy odwrotnej czy rozkładu \mathbf{LU} macierzy. Wykorzystuje ona elementarne operacje na macierzy takie jak mnożenie wiersza przez skalar czy odejmowanie od siebie dwóch wierszy.

Rozwiązywanie układów równań metodą eliminacji Gaussa

Opis działania

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

W pierwszym kroku zostaje wyeliminowana niewiadoma x_1 z $n-1$ równań poprzez odejmowanie dla $i = 2, \dots, n$ 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 $i = k+1, \dots, n$ 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 diagonalu 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 górną za pomocą *algorytmu podstawiania wstecz*. Polega on na obliczeniu:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j}{a_{ii}}$$

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.

Zastosowane modyfikacje

Jak już zostało wspomniane, macierz \mathbf{A} jest macierzą rzadką ponadto posiada ona specyficzną blokowo-trójdiodagonalną postać (2) co umożliwia zredukowanie w znacznym stopniu liczby wykonywanych operacji w stosunku do metody eliminacji Gaussa stosowanej dla macierzy gęstych.

Zauważyć można, że postać macierzy \mathbf{A} zapewnia, że wiele elementów znajdujących się pod diagonalą będzie zerami i nie będzie konieczne ich zerowanie.

Rozpatrując pierwszych $\ell - 2$ kolumn widać że elementy niezerowe mogą znajdować się jedynie w bloku \mathbf{A}_1 , a więc tylko w ℓ pierwszych rzędach. Idąc dalej, dla kolejnych ℓ kolumn wszystkie niezerowe elementy będą znajdować się najniżej w bloku \mathbf{B}_2 albo w bloku \mathbf{A}_3 – czyli 2ℓ pierwszych rzędach, a dla jeszcze następnych ℓ kolumn w blokach \mathbf{B}_3 i \mathbf{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 :

$$e_{non\ 0}(k) = \min \left\{ \ell + \ell \cdot \left\lfloor \frac{k+1}{\ell} \right\rfloor, n \right\} \quad (5)$$

Również, poza ostatnimi ℓ wierszami, w każdym wierszu ostatnim niezerowym elementem jest element leżący na diagonalu bloku \mathbf{C}_i . Można zauważyć, że owe elementy znajdują się zawsze w odległości ℓ od elementów na diagonalu macierzy \mathbf{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 :

$$k_{last}(r) = \min\{r + \ell, n\}. \quad (6)$$

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 \mathbf{C}_i w macierzy \mathbf{A} nie powstały żadne nowe elementy niezerowe. Wystarczy zatem dla każdego wiersza sumować elementy tylko do pewnej kolumny określonej wyprowadzonym wcześniej wzorem (6).

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.

Algorytm 1: Eliminacja Gaussa

Dane wejściowe:

- \mathbf{A} – dana w zadaniu macierz postaci (2),
- \mathbf{b} – wektor prawych stron,
- n – rozmiar macierzy \mathbf{A} ,
- ℓ – rozmiar bloku macierzy \mathbf{A} .

Dane wyjściowe:

- \mathbf{x} – wektor zawierający rozwiązania układu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$.

function eliminacja_gaussa(\mathbf{A} , \mathbf{b} , n , ℓ)

for $k \leftarrow 1$ **to** $n - 1$ **do**

$e_{non\ 0} \leftarrow \min\left(\ell + \ell \cdot \left\lfloor \frac{k+1}{\ell} \right\rfloor, n\right)$

$k_{last} \leftarrow \min(k + \ell, n)$

for $i \leftarrow k + 1$ **to** $e_{non\ 0}$ **do**

if $\mathbf{A}[k][k] = 0$ **then**

error współczynnik na przekątnej równy zero

$z \leftarrow \mathbf{A}[i][k] / \mathbf{A}[k][k]$

$\mathbf{A}[i][k] \leftarrow 0$

for $j \leftarrow k + 1$ **to** k_{last} **do**

$\mathbf{A}[i][j] \leftarrow \mathbf{A}[i][j] - z \cdot \mathbf{A}[k][j]$

$\mathbf{b}[i] \leftarrow \mathbf{b}[i] - z \cdot \mathbf{b}[k]$

for $i \leftarrow n$ **downto** 1 **do**

$k_{last} \leftarrow \min(i + \ell, n)$

for $j \leftarrow k + 1$ **to** k_{last} **do**

$\text{suma} \leftarrow \text{suma} + \mathbf{x}[i] \cdot \mathbf{A}[i][j]$

$\mathbf{x}[i] \leftarrow (\mathbf{b}[i] - \text{suma}) / \mathbf{A}[i][i]$

return \mathbf{x}

Powyżej został rozpatrzony wariant metody eliminacji Gaussa bez wyboru elementu głównego, czasami jednak lepiej sprawdza się algorytm z tzw. częściowym wyborem (umożliwia rozwiązanie układu kiedy na diagonalu macierzy pojawiają się elementy zerowe), w tym wypadku oznacza to wybranie wiersza, dla którego element w eliminowanej kolumnie i ma największą co do modułu wartość 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. Wpływ tego zabiegu na algorytm jest taki, że zamiast odwołania do konkretnego wiersza zostaje wykonane odwołanie do jego pozycji w wektorze permutacji.

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 moż-

na, że w czasie eliminowania współczynników z $\ell - 2$ 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:

$$k_{last}(k) = \min \left\{ 2\ell + \ell \cdot \left\lfloor \frac{k+1}{\ell} \right\rfloor, n \right\}. \quad (7)$$

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 $O(n)$.

Rozkład LU

Opis działania

Układy równań liniowych z niektórymi typami macierzy da się rozwiązać w sposób stosunkowo łatwy, takimi macierzami są np. macierze trójkątne – górna i dolna. Idea rozkładu LU macierzy A jest taka, żeby przedstawić ją za pomocą iloczynu

$$A = LU, \quad (8)$$

macierzy trójkątnej dolnej L z elementami na przekątnej równymi 1 i macierzy trójkątnej górnej U , za pomocą których układ równań da się rozwiązać w stosunkowo łatwy sposób.

Taki rozkład można uzyskać za pomocą znanej już metody eliminacji Gaussa. Metoda ta przekształca macierz A do macierzy trójkątnej górnej, która stanie się macierzą U . Macierz L zostaje stworzona poprzez zapamiętanie mnożników użytych do eliminacji kolejnych współczynników macierzy A i tak mnożnik użyty do wyzerowania elementu a_{ij} zapisujemy w i -tym wierszu i j -tej kolumnie macierzy L . Cały rozkład LU można przeprowadzić bezpośrednio na macierzy A oszczędzając w ten sposób pamięć.

Złożoność obliczeniowa wyznaczenia rozkładu LU to $O(n^3)$, umożliwia on jednak stosunkowo szybkie rozwiązywanie wielu układów równań w których macierz jest taka sama, a zmienia się wektor prawych stron. W tym wypadku eliminacja Gaussa o dużej złożoności wykonywana jest tylko raz, a rozwiązywanie układów dzieli się na dwa etapy:

$$\begin{cases} Lz = b \\ Ux = z, \end{cases} \quad (9)$$

co dzięki postaci macierzy L i U (macierze trójkątne) można wykonać w $O(n^2)$ operacji.

Algorytm 2: Eliminacja Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

Dane wejściowe:

- \mathbf{A} – dana w zadaniu macierz postaci (2),
- \mathbf{b} – wektor prawych stron.
- n – rozmiar macierzy \mathbf{A} ,
- ℓ – rozmiar bloku macierzy \mathbf{A} .

Dane wyjściowe:

- \mathbf{x} – wektor zawierający rozwiązania układu $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$.

function eliminacja_gaussa_z_elementem_głównym(\mathbf{A} , \mathbf{b} , n , ℓ)

```

p ← {i : i ∈ {1, ..., n}}
for k ← 1 to n − 1 do
  enon 0 ← min(ℓ + ℓ · ⌊ $\frac{k+1}{\ell}$ ⌋, n)
  klast ← min(2ℓ + ℓ · ⌊ $\frac{k+1}{\ell}$ ⌋, n)
  for i ← k + 1 to enon 0 do
    rmax ← m takie, że:  $\mathbf{A}[p[m]][k] = \max(|\mathbf{A}[p[q]][k]| : q \in \{i, \dots, e_{non\ 0}\})$ 
    if p[rmax] = 0 then
      error macierz osobliwa
    swap (p[k], p[rmax])
    z ←  $\mathbf{A}[p[i]][k] / \mathbf{A}[p[k]][k]$ 
     $\mathbf{A}[p[i]][k] \leftarrow 0$ 
    for j ← k + 1 to klast do
       $\mathbf{A}[p[i]][j] \leftarrow \mathbf{A}[p[i]][j] - z \cdot \mathbf{A}[p[k]][j]$ 
     $\mathbf{b}[p[i]] \leftarrow \mathbf{b}[p[i]] - z \cdot \mathbf{b}[p[k]]$ 
  for i ← n downto 1 do
    klast ← min(2ℓ + ℓ · ⌊ $\frac{p[i]+1}{\ell}$ ⌋, n)
    for j ← k + 1 to klast do
      suma ← suma +  $\mathbf{x}[j] \cdot \mathbf{A}[p[i]][j]$ 
     $\mathbf{x}[i] \leftarrow (\mathbf{b}[p[i]] - \text{suma}) / \mathbf{A}[p[i]][i]$ 
return x

```

Zastosowane modyfikacje

Rozkład \mathbf{LU} dla macierzy \mathbf{A} w postaci 2 jest wyznaczany w sposób bardzo podobny do metody eliminacji Gaussa. Jednak zamiast zerowania elementów a_{ik} podstawiane są mnożniki $z = a_{ik}/a_{kk}$, które stanowią elementy macierzy \mathbf{L} .

Złożoność obliczeniowa wyznaczenia takiego rozkładu jest w oczywisty sposób taka sama, co złożoność dla metody eliminacji Gaussa bez wyboru elementu głównego (Algorytm 1) czy z częściowym jego wyborem (Algorytm 2), a więc, przy założeniu, że ℓ jest stałą, wynosi $O(n)$.

W celu rozwiązania układu równań liniowych $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, gdzie $\mathbf{A} = \mathbf{LU}$ czyli $\mathbf{LUx} = \mathbf{b}$ należy podzielić obliczenia na dwa etapy 9. Drugi etap obliczeń czyli rozwiązanie układu $\mathbf{Ux} = \mathbf{z}$ nie różni się w zasadzie niczym od algorytmu podstawiania wstecz, nie ulega także zmianie wartość k_{last} , która wskazuje na to do której kolumny w danym wierszy należy sumować. Aby rozwiązać układ $\mathbf{Lz} = \mathbf{b}$ należy zastosować algorytm podstawiania w przód, który jest podobny do algorytmu podstawiania wstecz, jednak zaczyna się od pierwszego wiersza i sumowane są elementy z kolumn coraz dalszych, a nie coraz wcześniejszych. Algorytm obliczania $\mathbf{Lz} = \mathbf{b}$ został oczywiście odpowiednio zoptymalizowany ze względu na specyficzną postać macierzy. Warto zauważyć że elementy zerowe w macierzy \mathbf{L} są na tych samych indeksach co te w macierzy

A. Niepotrzebne jest więc rozpoczynanie sumowania od pierwszej kolumny dla każdego wiersza. W zasadzie takie sumowanie ma miejsce tylko dla ℓ pierwszych wierszy. Dla kolejnych ℓ wystarczy sumować od kolumny $\ell - 1$, a dla jeszcze dalszych ℓ kolumny $2\ell - 1$, itd. Tę zależność można przedstawić za pomocą następującego ogólnego wzoru:

$$k_{from}(r) = \max \left\{ \ell \cdot \left\lfloor \frac{r-1}{\ell} \right\rfloor - 1, 1 \right\}. \quad (10)$$

Metodę rozwiązywania układu równań liniowych za pomocą rozkładu LU macierzy A prezentuje Algorytm 3.

Złożoność obliczeniowa rozwiązywania układu równań liniowych z rozkładu LU wynosi $O(n)$, ponieważ rozwiązanie $Ux = z$ ma taką samą złożoność jak w metodzie Gaussa, a rozwiązanie $Lz = b$ w oczywisty sposób ma także zbliżoną do tej złożoność.

Algorytm 3: Rozwiązywanie układu równań przy użyciu rozkładu LU .

Dane wejściowe:

- A – macierz (2) po przekształceniu do postaci, gdzie nad przekątną znajdują się elementy macierzy U , a pod przekątną L ,
- b – wektor prawych stron.
- n – rozmiar macierzy A ,
- ℓ – rozmiar bloku macierzy A .

Dane wyjściowe:

- x – wektor zawierający rozwiązania układu $Ax = b$.

function rozwiązanie_LU(A, b, n, ℓ)

```

for i ← 1 to n do
    suma ← 0
     $k_{from} \leftarrow \min \left( \ell \cdot \left\lfloor \frac{i-1}{\ell} \right\rfloor, n \right)$ 
    for j ←  $k_{from}$  to i - 1 do
        suma ← suma + z[j] · A[i][j]
    z[i] = b[i] - suma
for i ← n downto 1 do
    suma ← 0
     $k_{last} \leftarrow \min(i + \ell, n)$ 
    for j ← i + 1 to  $k_{last}$  do
        suma ← suma + x[j] · A[i][j]
    x[i] ← (z[i] - suma) / A[i][i]
return x
```

Wyniki

Wnioski