Poniedziałek 7:30, TN

Obliczenia naukowe: sprawozdanie z laboratorium

LISTA NR 5

JAKUB IWON

1. Wstęp

Celem zadań było napisanie funkcji rozwiązujących układ równań liniowych postaci

$$Ax = b$$

oraz wyznaczających rozkład LU macierzy A.

Macierz współczynników $A \in R^{nxn}$ ma następującą strukturę:

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

gdzie $v = \frac{n}{l}$ ($l \geq 2$, rozmiar macierzy wewnętrznych).

Macierz wewnętrzna B_k ma postać:

$$B_k = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & b^k_{1\,l-1} & b^k_{1\,l} \\ 0 & \dots & 0 & b^k_{2\,l-1} & b^k_{2\,l} \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & b^k_{l\,l-1} & b^k_{l\,l} \end{pmatrix}$$

natomiast macierz wewnętrzna C_k ma postać:

$$C_k = \begin{pmatrix} c^k_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c^k_2 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & c^k_{l-1} & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & c^k_l \end{pmatrix}$$

2. Metoda eliminacji Gaussa

2.1. Metoda eliminacji Gaussa bez wyboru elementu głównego

Metoda eliminacji Gaussa polega na sprowadzeniu macierzy do postaci macierzy trójkątnej górnej a następnie rozwiązaniu układu równań stosując podstawienie wstecz. Przekształcenie dokonuje się eliminując odpowiednie zmienne z kolejnych wierszy i tak najpierw eliminowana jest zmienna x_1 z wierszy o indeksach $2 \dots n$ następnie zmienna x_2 z wierszy $3 \dots n$ i dalej aż do eliminacji zmiennej x_{n-1} z n-tego wiersza. Usuwanie zmiennych odbywa się poprzez odejmowanie odpowiedniej krotności aktualnego wiersza od niższych wierszy. Krotność ta to iloraz współczynników stojących przy aktualnie usuwanej zmiennej w rozpatrywanych wierszach. Złożoność tego algorytmu to $O(n^3)$ jednak z uwagi na specyficzną strukturę macierzy A algorytm ten może rozwiązać ten układ równań w czasie liniowym.

Optymalizacja algorytmu polega na tym, że przy eliminacji poszczególnych zmiennych rozpatrywane są jedynie elementy o indeksach w ograniczonym zakresie. Zakres ten obejmuje jedynie niezerowe elementy macierzy A. Zauważyć można, że dla pierwszych $l-2$ kolumn elementy niezerowe mogą występować jedynie w pierwszych l rzędach. Dla kolejnych l kolumn elementy niezerowe występują w pierwszych $2l$ rzędach. Można stąd wywnioskować, że dla kolumny j numerem ostatniego rzędu o niezerowych elementach jest rząd o indeksie $i = l * (\left\lfloor \frac{j+1}{l} \right\rfloor + 1)$. Można zauważyć, że indeks ten może przekroczyć wartość n. Należy wtedy podstawić $i = n$. Analogicznie można obliczyć indeks ostatniej kolumny j, w której dla danego rzędu o indeksie i występują elementy niezerowe. Dla każdego rzędu z wyjątkiem ostatnich l wierszy kolumnę tą wyznacza niezerowy element macierzy C_k. Zależność tę można przedstawić jako $j = i + l$. Ponownie należy zwrócić uwagę na możliwość przekroczenia rozmiaru macierzy i w razie potrzeby podstawić $j = n$.

Biorąc pod uwagę, że l jest stałą, złożoność algorytmu wynosi $O(n)$. W celu efektywnego pamiętania macierzy A został użyty *skompresowany format kolumnowy* dostępny w module *`SparseArrays`* języka `Julia`.

2.2. Metoda eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

Metoda eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego posiada jedną modyfikację w stosunku do algorytmu opisanego powyżej. Aby uniknąć sytuacji gdy przy liczeniu ilorazu współczynników dzielnik jest zbyt bliski zeru jest on wybierany jako maksymalny element w danej kolumnie. W tym celu stosuje się zamianę wierszy tak aby element maksymalny znajdował się na przekątnej macierzy. Zamiana wierszy powoduje, że elementy niezerowe mogą pojawiać się w kolumnach o indeksach przekraczających zakres oszacowany w podstawowym wariancie algorytmu. Ostatnią niezerową kolumnę j dla wiersza i można obliczyć stosując wzór $j = l * (\left\lfloor\frac{i+1}{l}\right\rfloor + 2)$ (oszacowanie to wynika z ograniczenia zakresu kolumn dla najniższego wiersza, który może być użyty w zamianie). Ponownie należy uważać na możliwość przekroczenia rozmiaru macierzy. Aby uniknąć czasochłonnej operacji zamiany wierszy, stworzono tablicę zawierającą aktualne pozycje wierszy.

3. Rozkład LU

3.1. Wyznaczenie rozkładu LU

Rozkład LU ma na celu przekształcenie macierzy A do postaci $A = LU$, gdzie L jest macierzą trójkątną dolną, natomiast U jest macierzą trójkątną górną. Rozkład LU macierzy A można uzyskać stosując metodę eliminacji Gaussa. Elementami macierzy U są współczynniki macierzy trójkątnej górnej powstałej w skutek zastosowania eliminacji Gaussa, natomiast elementami macierzy L są ilorazy współczynników używane przy odejmowaniu wierszy od siebie ($a_{ik} = \frac{a_{ik}}{a_{kk}}$). Do zapamiętania macierzy L oraz U użyto macierzy A.

3.2. Rozwiązywanie układu równań z użyciem rozkładu LU

Wyznaczony rozkład LU może posłużyć do rozwiązania układu równań postaci $Ax = LUx = b$. Aby znaleźć rozwiązanie x należy rozwiązać równania:

$$Lz = b$$

$$Ux = z$$

Z uwagi na to, że zarówno macierz L jak i U są w postaci trójkątnej, rozwiązanie tych równań sprowadza się do odpowiednio podstawienia „w przód” dla równania pierwszego oraz „wstecz” dla równania drugiego. Biorąc pod uwagę strukturę macierzy A a tym samym również macierzy L oraz U nie ma potrzeby rozpatrywania wszystkich kolumn przy sumowaniu w procesie podstawiania. W przypadku pierwszego równania można ominąć elementy zerowe w początkowych kolumnach natomiast w przypadku równania drugiego pomijane są kolumny zerowe znajdujące się na końcu.

4. Wyniki oraz wnioski

Tabela przedstawiająca błędy względne dla poszczególnych algorytmów oraz rozmiarów macierzy A.

n	**Eliminacja Gaussa**	**Eliminacja Gaussa z wyborem**	$\boldsymbol{LUx = b}$	$\boldsymbol{LUx = b}$ **(z wyborem)**
16	5.453105385e-16	5.003707553e-16	4.574031282e-15	5.064917260e-16
64	1.821218424e-15	2.665835984e-16	1.034989002e-15	2.419674984e-16
100	11.47325382e-15	2.217668754e-16	1.681465666e-15	2.195323915e-16
500	1.878896260e-15	2.233177116e-16	2.916883609e-15	2.169910949e-16
1000	7.744581122e-15	2.420184336e-16	7.725351917e-15	2.308356319e-16
5000	1.727571390e-14	2.417330584e-16	2.228481813e-14	2.284309166e-16
10000	3.673820219e-14	4.478865903e-16	3.630437761e-14	4.469595745e-16
50000	9.447293155e-14	5.427796231e-16	9.127843964e-14	5.322902898e-16

Jak widać w powyższej tabeli algorytmy korzystające z wyboru elementu głównego zwracały wynik obarczony mniejszym błędem. Wyniki zwracana przez metodę eliminacji Gaussa oraz z wykorzystaniem rozkładu LU są bardzo zbliżone do siebie dla odpowiadających sobie wariantów.

Tabela przedstawiająca czas działania podany w sekundach dla poszczególnych algorytmów oraz rozmiarów macierzy A.

n	**Eliminacja Gaussa**	**Eliminacja Gaussa z wyborem**	$\boldsymbol{LUx = b}$	$\boldsymbol{LUx = b}$ **(z wyborem)**
16	0.000018	0.000036	0.000020	0.000034
64	0.000040	0.000120	0.000049	0.000132
100	0.000060	0.000185	0.000072	0.000189
500	0.000488	0.001093	0.000531	0.001080
1000	0.002046	0.003143	0.002142	0.003235
5000	0.050752	0.056758	0.050797	0.056400
10000	0.236269	0.247620	0.237951	0.248356
50000	6.165753	6.697192	6.265696	6.510637

Patrząc na dane w powyższej tabeli można wnioskować, że algorytmy korzystające z wyboru elementu głównego są nieznacznie wolniejsze, jednak jak widać było w tabeli poprzedniej zwracają one dokładniejsze wyniki.