Obliczenia Naukowe Lista 5

Kamil Włodarski

12 stycznia 2023

1 Wstęp

Problem przedstawiony na liście polegał na rozwiązaniu układu równań liniowych postaci:

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$$

gdzie Macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ jest macierzą rzadką o specjalnej postaci:

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

Przy czym $n \geqslant 4$ a macierze A_i, B_i, C_i są macierzami kwadratowymi o rozmiarze $l \times l$ gdzie macierze są następującej postaci:

- A_i macierz pełna
- B_i pierwszy wiersz i ostatnia kolumna są wypełnione wartościami
- C_i macierz jest wypełniona wartościami na przekątnej

Pozostałe komórki tych macierzy wypełnione są zerami. Naszym zadaniem jest opracowanie efektywnego sposobu na pamiętanie tych macierzy oraz efektywnego rozwiązywania równań liniowych.

2 Rozwiązanie

2.1 Przechowywanie

Przechowywanie Macierzy zostało zaimplementowane jako struktura trzymająca rozmiar macierzy, rozmiar pod-macierzy oraz Macierz rozmiarów $n \times l$ która pamięta jedynie wartości nie zerowe wokół przekątnej Macierzy $\mathbf{A}$. Dodatkowo nadpisane są dla niej funkcje get_index() oraz set_index() aby odczyty danych ze struktury odpowiadał zapisowi i odczytowi z macierzy $\mathbf{A}$ wokół przekątnej (odczyt w pozostałych miejscach zwraca 0.0 a zapis wyrzuca błąd).

2.2 Podstawy teoretyczne

2.2.1 Eliminacja Gaussa

Metoda eliminacji Gaussa jest jednym z najpopularniejszych sposobów rozwiązywania układów równań liniowych. Polega ona na eliminowaniu zmiennych z równań poprzez operacje algebraiczne na macierzy.

Etap pierwszy: Polega na przekształceniu macierzy układu równań w macierz trójkątną górną. W tym celu należy wykonać operację eliminacji na pierwszym równaniu (w którym pierwsza zmienna jest różna od zera) i zastosować ją do pozostałych równań. Następnie postępujemy analogicznie dla kolejnych równań.

Etap drugi to tzw. eliminacja odwrotna. Polega ona na rozwiązaniu układu równań trójkątnego górnego. W tym celu należy rozwiązać równanie dla ostatniej nieznanej, a następnie wykorzystać rozwiązanie do rozwiązania równań dla pozostałych nieznanych.

Metoda eliminacji Gaussa ma kilka zalet, takich jak: prostota implementacji, złożoność obliczeniowa $O(n^3)$, oraz dobre własności numeryczne. Jednakże, jest ona wrażliwa na błędy zaokrągleń.

2.2.2 Eliminacja gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

Metoda eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego (ang. partial pivoting) jest modyfikacją standardowej metody eliminacji Gaussa. Polega ona na tym, że przed każdym etapem eliminacji podstawowej wybieramy element główny (największy moduł) z kolumny, dla której przeprowadzamy eliminację i przesuwamy równanie zawierające ten element na pierwsze miejsce.

Taka modyfikacja pozwala na zwiększenie odporności metody na błędy zaokrągleń oraz na układy równań z różnymi współczynnikami przy nieznanych. Dzieje się tak, ponieważ wybór elementu głównego pozwala na uniknięcie sytuacji, w której współczynnik przy nieznanej jest bliski zeru, co prowadzi do dużych błędów numerycznych (Podczas dzielenia przez ten element).

Jednakże, metoda eliminacji Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego ma też kilka wad, takich jak: większa złożoność obliczeniowa (wciąż pozostaje ona asymptotycznie $O(n)$) oraz konieczność przestawiania wierszy miejscami co w zależności od implementacji może być kosztowne.

2.2.3 Rozkład LU

Rozkład LU (ang. LU decomposition) jest jednym z popularnych sposobów rozwiązywania układów równań liniowych. Polega on na rozkładzie macierzy A na iloczyn dwóch macierzy L i U, gdzie macierz L jest macierzą trójkątną dolną z jedynkami na przekątnej, a macierz U jest macierzą trójkątną górną.

Rozkładu tego dokonuje się właśnie przy użyciu metody eliminacji Gaussa, gdzie U jest macierzą uzyskiwaną w klasycznym rozkładzie, a L zapełniana jest przez zapamiętywanie mnożników użytych do zerowania elementów; Także dla tej metody istnieje modyfikacja z wyborem elementu głównego w celu uniknięcia błędów związanych z zerami i jest ona analogiczna jak w poprzedniej metodzie. Złożoność obliczeniowa rozkładu jest równa złożoności eliminacji Gaussa, czyli wynosi $O(n^3)$, natomiast złożoność rozwiązania otrzymanego układu z U, L wynosi $O(n^2)$.

2.3 Optymalizacje dla naszego przypadku

Poza optymalizacją pamięciową związaną z rozmiarem przechowywanej przez nas macierzy możemy również wykorzystać fakt że większość macierzy wypełniona jest zerami aby zmniejszyć złożoność obliczeniową do $O(nl^2)$ co dla stałego l możemy zapisać jako $O(n)$. Robimy to ograniczając zakresy po jakich iterujemy w wewnętrznych pętlach do zakresów w których wartość nie są zerowe. Tego typu optymalizacje możemy wprowadzić dla wszystkich przytoczonych wcześniej algorytmów.

3 Wyniki

W poniższych tabelach i na wykresie znajdują się wyniki badań eksperymentów

rozmiar	błąd względny	czas
16	1.466850003875454e-15	2.8e-6
10000	2.6979457399889918e-14	0.0011807
50000	5.983696068447594e-14	0.0059234
100000	7.422229851374492e-13	0.0163295
300000	6.521306370065581e-14	0.0355633
500000	8.329169633245345e-14	0.0601926

Tabela 1: Metoda eliminacji Gaussa

rozmiar	błąd względny	czas
16	3.3766115072321297e-16	4.8e-6
50000	5.378168315102863e-16	0.0128193
10000	4.952490752895815e-16	0.0023561
100000	5.199630892522782e-16	0.036911199
300000	4.554950254748486e-16	0.0698167
500000	4.507270850385053e-16	0.164684302

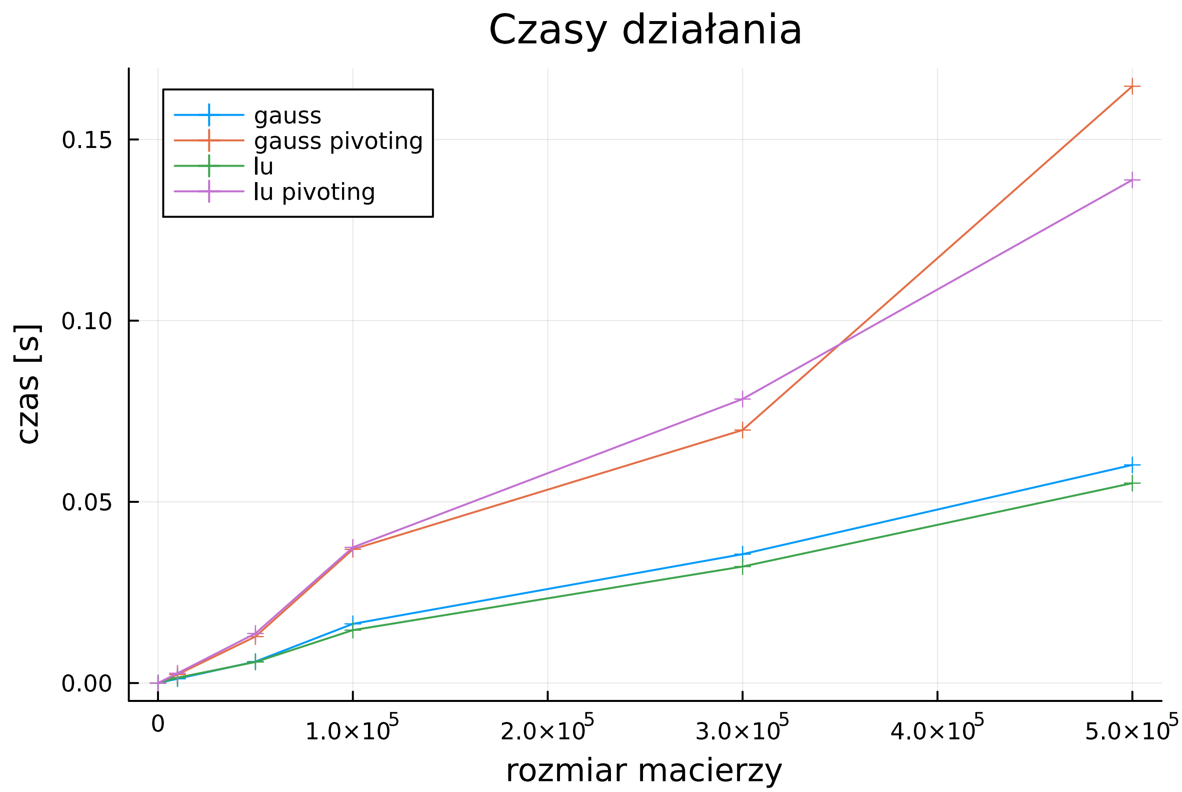
Tabela 2: Metoda eliminacji Gaussa z cześciowym wyborem elementu głównego

rozmiar	błąd względny	czas
16	1.466850003875454e-15	4.000000000000001e-6
10000	2.6979457399889918e-14	0.0014748
50000	5.983696068447594e-14	0.0058054000000000005
100000	7.422229851374492e-13	0.0145987
300000	6.521306370065581e-14	0.0321478
500000	8.329169633245345e-14	0.055162699999999995

Tabela 3: Rozkład LU

rozmiar	błąd względny	czas
16	3.3766115072321297e-16	5.3e-6
10000	4.952490752895815e-16	0.0027026
50000	5.378168315102863e-16	0.0136767
100000	5.199630892522782e-16	0.037447201
300000	4.554950254748486e-16	0.078371101
500000	4.507270850385053e-16	0.138831303

Tabela 4: Rozkład LU z częściowym wyborem elementu głównego



Rysunek 1: Wykres zależności czasu wykonywania algorytmu od rozmiaru macierzy

4 Wnioski

Z wykresu 1 możemy zaobserwować liniowość algorytmów co pokrywa się z naszymi założeniami z części teoretycznej. Możemy również zauważyć że warianty algorytmów z wyborem elementu głównego wykonują się dłużej od swoich podstawowych odpowiedników. Warto jednak zwrócić uwagę na wyniki z tabel które pokazują nam że ta strata w złożoności obliczeniowej poprawia błąd względny który jest około 100 krotnie mniejszy.