Вычисление функций от матриц размеров n = 2 и 3.

Повелители Матрицы.

Воронцов Игорь
Поршин Игорь
Савченко Ольга

Введение

- В проекте сравнивается эффективность (скорость и точность) различных алгоритмов вычисления аналитических функций от маленьких матриц
- Хотим определить, какие алгоритмы самые эффективные
- **Гипотеза:** встроенные реализации матричных функций, которые обычно используют, одинаково работают для матриц разных размеров. Оптимизации под маленькие матрицы не сделано, поэтому эти алгоритмы можно улучшить.
- Матрицы маленького размера играют огромную роль в практических приложениях: программирование графики, видео, управление роботами и дронами, создание обучающих данных для систем огневого поражения БПЛА, решение систем дифференциальных уравнений, и так далее. Но обычно даже специализированные библиотеки используют те же методы, что и scipy.
- Качество работы алгоритмов проверяем по максимально достижимой точности и по скорости работы при достижении одинаковой точности. В случае, если метод не может достичь точности встроенного алгоритма, сравниваем скорость работы при максимальной точности вычислений, которую он может дать.

Описание методов

Были рассмотрены вычисление степеней матриц, в том числе дробных; вычисление квадратных корней из матриц, экспонент и логарифмов.

Рассмотрены методы:

- Встроенные – это аппроксимация Паде переменного порядка с масштабированием и многократным возведением в квадрат, быстрый алгоритм возведения в целую степень, алгоритм Шура-Паде для вычисления дробных степеней матрицы и матричного логарифма, блочный алгоритм Шура для квадратного корня.

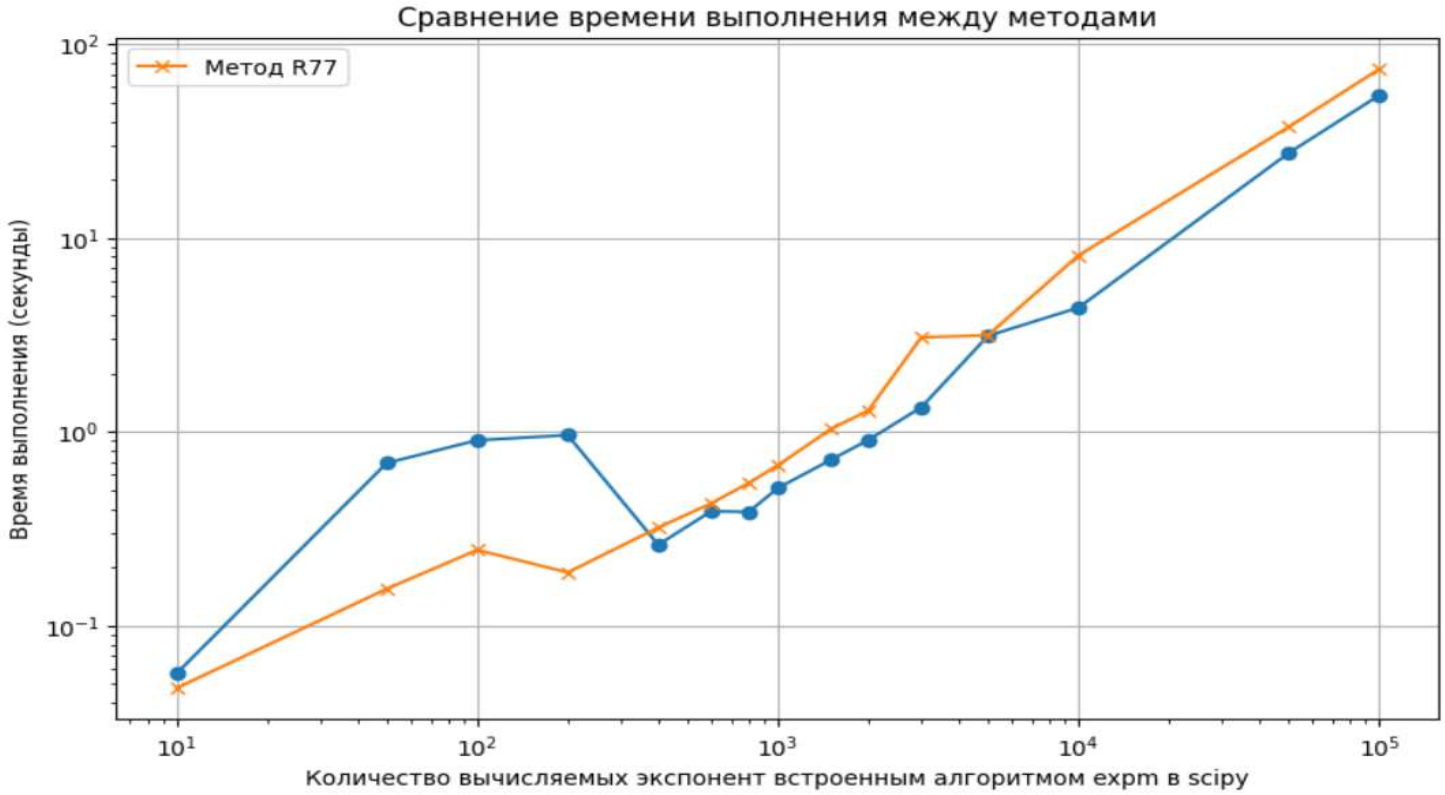
- Реализованные самостоятельно – это использование аналитических формул, ряд Тейлора, собственная реализация аппроксимаций Паде, метод гибридных чисел, вычисление экспоненты с помощью второго замечательного предела, вычисление степеней с помощью экспоненты от логарифма, метод Ньютона для матричного квадратного корня, диагонализация матриц, разложение Шура, вычисление экспоненты симметричных матриц с помощью нахождения собственных чисел через решение кубического уравнения, а также вычисление экспоненты кососимметричных матриц и логарифма ортогональных с помощью метода, который основан на формуле Родригеса.

Аналитический метод на основе гибридных чисел.

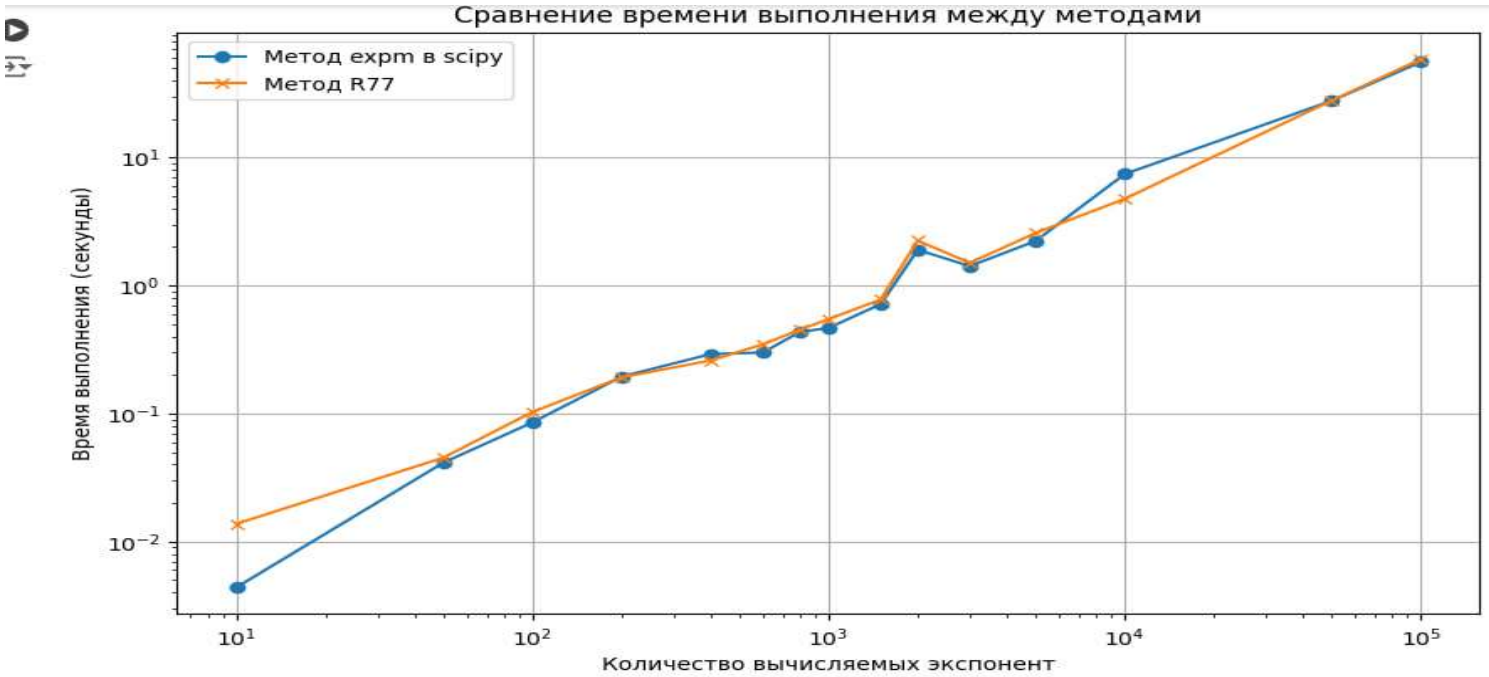
Для матриц размера 2 на 2 существует теория, рассматривающая эти матрицы как гибридные числа (параболические, эллиптические, гиперболические, которые затем делятся на времениподобные, пространственно-подобные и светоподобные). Для каждого вида гибридных чисел есть собственное полярное представление и собственный вариант обобщенной формулы Муавра.

Вычисление по этой формуле в соответствии с алгоритмом, приведенным в научной статье, было реализовано. В результате сравнений оказалось, что алгоритм уступает другим аналитическим методам из-за использования плохо обусловленных в окрестностях некоторых значений функций: логарифмов и отношений обычных и гиперболических синусов к своему малому аргументу. Метод можно доработать, улучшив вычисление каждой функции, но в этом нет необходимости – более общий аналитический подход работает лучше.

Аппроксимации Паде – собственные и встроенные.

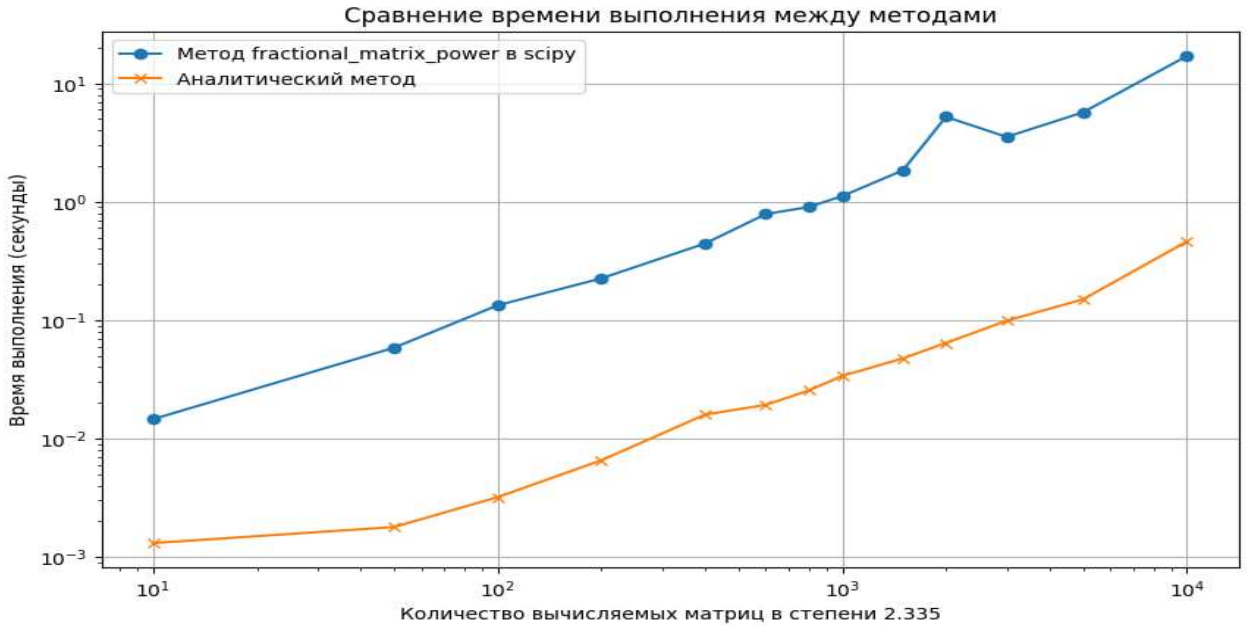


Для получения точности не хуже встроенного метода потребовался 14-й порядок аппроксимации. Встроенный работает быстрее. После оптимизации вычислений удалось приблизить скорость к работе встроенного алгоритма.



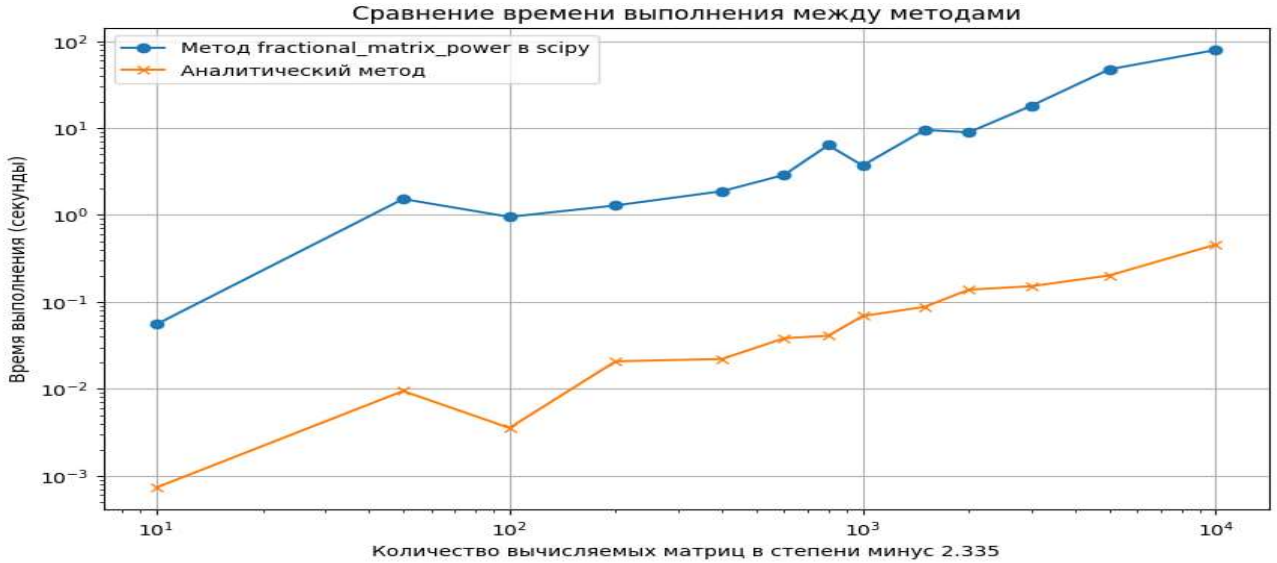

```
Количество экспонент: 10, Время выполнения (scipy): 0.004397 секунд, Время выполнения (R): 0.013771 секунд
Количество экспонент: 50, Время выполнения (scipy): 0.041371 секунд, Время выполнения (R): 0.045296 секунд
Количество экспонент: 100, Время выполнения (scipy): 0.085405 секунд, Время выполнения (R): 0.102998 секунд
Количество экспонент: 200, Время выполнения (scipy): 0.194597 секунд, Время выполнения (R): 0.192031 секунд
Количество экспонент: 400, Время выполнения (scipy): 0.291656 секунд, Время выполнения (R): 0.260013 секунд
Количество экспонент: 600, Время выполнения (scipy): 0.300134 секунд, Время выполнения (R): 0.347605 секунд
Количество экспонент: 800, Время выполнения (scipy): 0.434099 секунд, Время выполнения (R): 0.452543 секунд
Количество экспонент: 1000, Время выполнения (scipy): 0.466171 секунд, Время выполнения (R): 0.546821 секунд
Количество экспонент: 1500, Время выполнения (scipy): 0.716538 секунд, Время выполнения (R): 0.778227 секунд
Количество экспонент: 2000, Время выполнения (scipy): 1.901771 секунд, Время выполнения (R): 2.242707 секунд
Количество экспонент: 3000, Время выполнения (scipy): 1.418882 секунд, Время выполнения (R): 1.503171 секунд
Количество экспонент: 5000, Время выполнения (scipy): 2.226623 секунд, Время выполнения (R): 2.573370 секунд
Количество экспонент: 10000, Время выполнения (scipy): 7.423269 секунд, Время выполнения (R): 4.757084 секунд
Количество экспонент: 50000, Время выполнения (scipy): 27.735253 секунд, Время выполнения (R): 27.850013 секунд
Количество экспонент: 100000, Время выполнения (scipy): 55.666855 секунд, Время выполнения (R): 58.594317 секунд
```

Аналитический метод намного быстрее библиотечного вычисляет дробную степень матрицы.




```
Количество степеней: 10, Время выполнения (scipy): 0.014578 секунд, Время выполнения (R): 0.001307 секунд
Количество степеней: 50, Время выполнения (scipy): 0.058470 секунд, Время выполнения (R): 0.001786 секунд
Количество степеней: 100, Время выполнения (scipy): 0.133583 секунд, Время выполнения (R): 0.003193 секунд
Количество степеней: 200, Время выполнения (scipy): 0.225527 секунд, Время выполнения (R): 0.006550 секунд
Количество степеней: 400, Время выполнения (scipy): 0.444829 секунд, Время выполнения (R): 0.015930 секунд
Количество степеней: 600, Время выполнения (scipy): 0.788174 секунд, Время выполнения (R): 0.019233 секунд
Количество степеней: 800, Время выполнения (scipy): 0.904253 секунд, Время выполнения (R): 0.025478 секунд
Количество степеней: 1000, Время выполнения (scipy): 1.118044 секунд, Время выполнения (R): 0.033791 секунд
Количество степеней: 1500, Время выполнения (scipy): 1.845243 секунд, Время выполнения (R): 0.047562 секунд
Количество степеней: 2000, Время выполнения (scipy): 5.226793 секунд, Время выполнения (R): 0.064189 секунд
Количество степеней: 3000, Время выполнения (scipy): 3.536763 секунд, Время выполнения (R): 0.098982 секунд
Количество степеней: 5000, Время выполнения (scipy): 5.709252 секунд, Время выполнения (R): 0.149979 секунд
Количество степеней: 10000, Время выполнения (scipy): 17.036253 секунд, Время выполнения (R): 0.462106 секунд
```

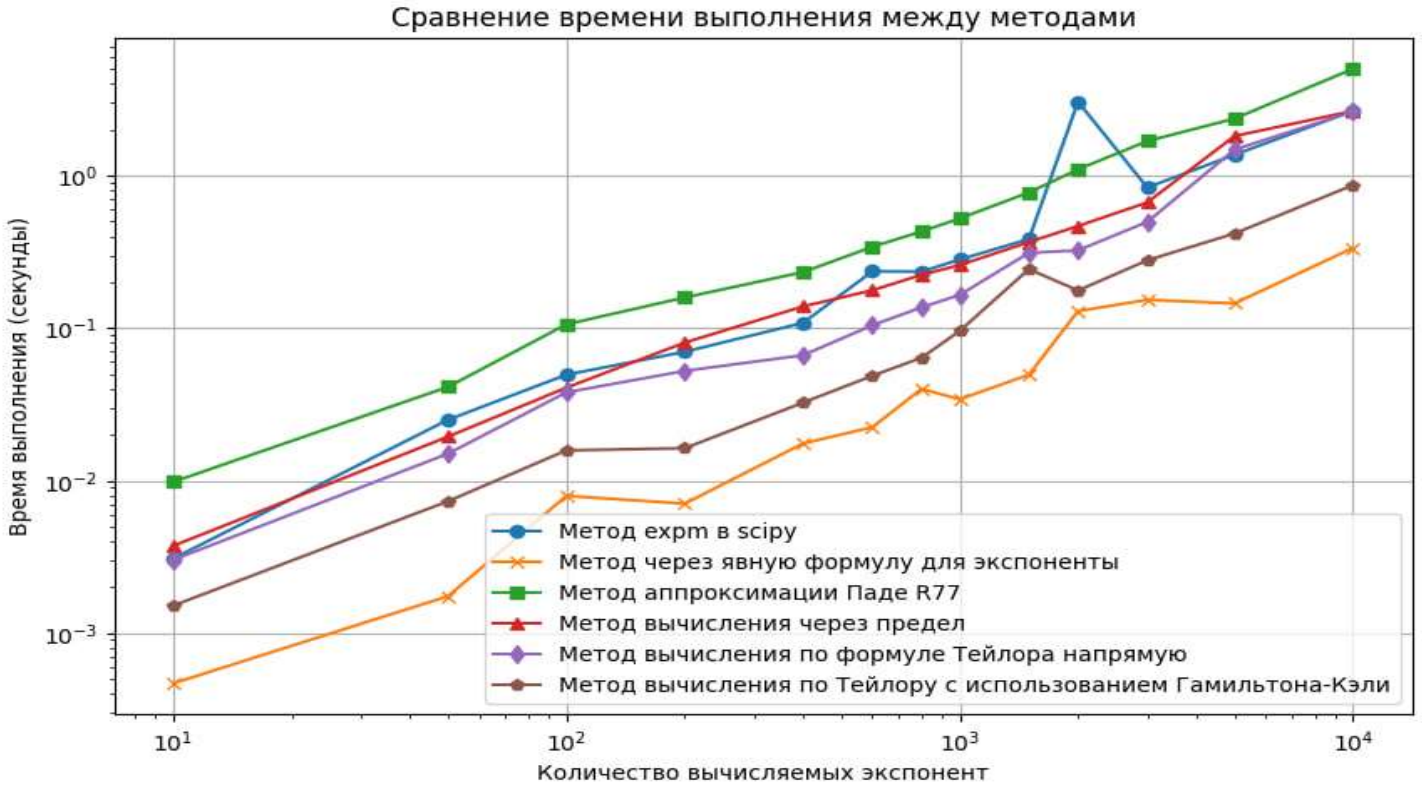
Если степень отрицательная и дробная, аналитический метод в сотни раз быстрее.




```
# Вывод результатов
for n, t_scipy, t_R in zip(num_power, execution_times, execution_times_R):
    print(f"Количество степеней: {n}, Время выполнения (scipy): {t_scipy:.6f} секунд, Время выполнения (R): {t_R:.6f} се
```

```
Количество степеней: 10, Время выполнения (scipy): 0.055180 секунд, Время выполнения (R): 0.000732 секунд
Количество степеней: 50, Время выполнения (scipy): 1.526783 секунд, Время выполнения (R): 0.009457 секунд
Количество степеней: 100, Время выполнения (scipy): 0.951416 секунд, Время выполнения (R): 0.003553 секунд
Количество степеней: 200, Время выполнения (scipy): 1.288175 секунд, Время выполнения (R): 0.020760 секунд
Количество степеней: 400, Время выполнения (scipy): 1.877531 секунд, Время выполнения (R): 0.022062 секунд
Количество степеней: 600, Время выполнения (scipy): 2.891839 секунд, Время выполнения (R): 0.038275 секунд
Количество степеней: 800, Время выполнения (scipy): 6.361767 секунд, Время выполнения (R): 0.040813 секунд
Количество степеней: 1000, Время выполнения (scipy): 3.702780 секунд, Время выполнения (R): 0.068814 секунд
Количество степеней: 1500, Время выполнения (scipy): 9.520500 секунд, Время выполнения (R): 0.087835 секунд
Количество степеней: 2000, Время выполнения (scipy): 8.920035 секунд, Время выполнения (R): 0.138425 секунд
Количество степеней: 3000, Время выполнения (scipy): 17.961743 секунд, Время выполнения (R): 0.151571 секунд
Количество степеней: 5000, Время выполнения (scipy): 47.364666 секунд, Время выполнения (R): 0.201518 секунд
Количество степеней: 10000, Время выполнения (scipy): 78.989968 секунд, Время выполнения (R): 0.456645 секунд
```

Сравнение методов вычисления матричных экспонент от матриц 2 на 2.



Аналитический метод и ускорение расчета степеней матрицы в формуле Тейлора через уравнение Гамильтона-Кэли значительно опережают библиотечную реализацию.

Встроенный матричный логарифм удалось обогнать более чем в 50 раз!


```
Количество логарифмов: 10, Время выполнения (scipy): 0.039851 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.001590 секунд
Количество логарифмов: 50, Время выполнения (scipy): 0.153577 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.001888 секунд
Количество логарифмов: 100, Время выполнения (scipy): 0.541420 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.015835 секунд
Количество логарифмов: 200, Время выполнения (scipy): 0.959634 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.013700 секунд
Количество логарифмов: 400, Время выполнения (scipy): 2.195255 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.040346 секунд
Количество логарифмов: 600, Время выполнения (scipy): 1.928695 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.025115 секунд
Количество логарифмов: 800, Время выполнения (scipy): 1.298252 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.030085 секунд
Количество логарифмов: 1000, Время выполнения (scipy): 1.639570 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.037729 секунд
Количество логарифмов: 1500, Время выполнения (scipy): 5.394557 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.071582 секунд
Количество логарифмов: 2000, Время выполнения (scipy): 3.483544 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.080075 секунд
Количество логарифмов: 3000, Время выполнения (scipy): 5.000974 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.166964 секунд
Количество логарифмов: 5000, Время выполнения (scipy): 11.621601 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.163855 секунд
Количество логарифмов: 10000, Время выполнения (scipy): 37.989411 секунд, Время выполнения с помощью аналитической формулы 0.685144 секунд
```

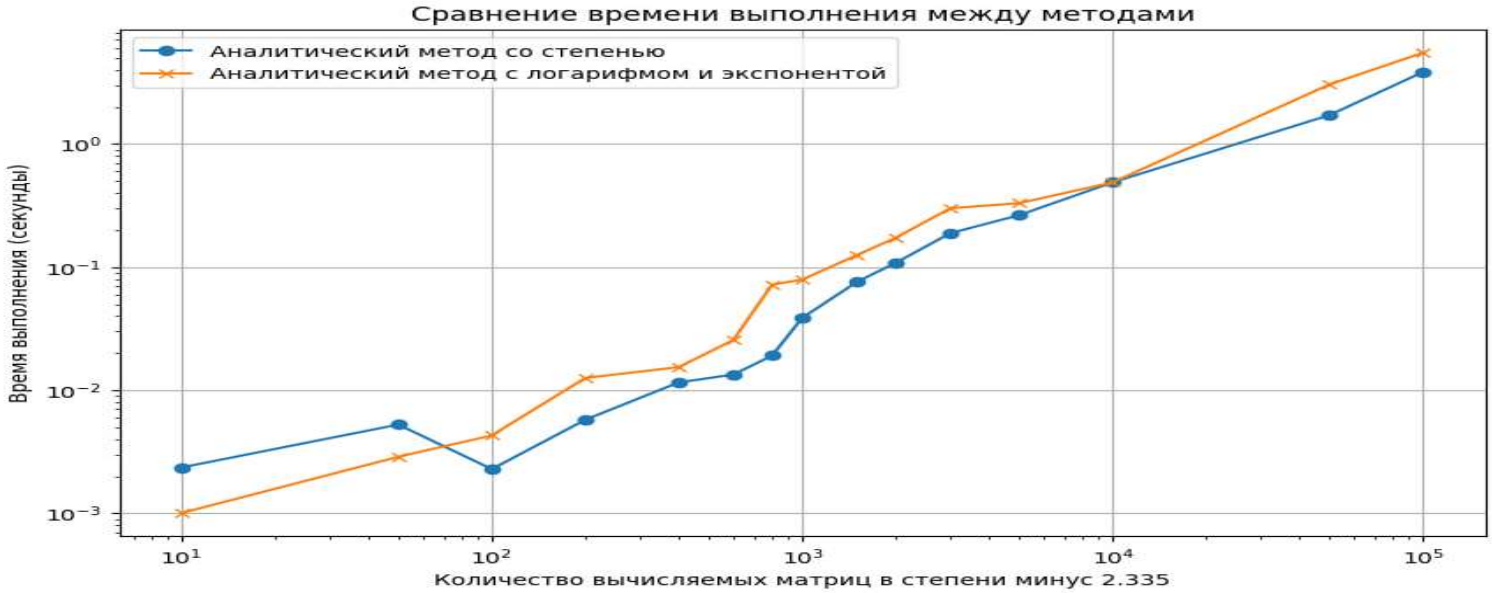
При этом точность аналитического расчета матричного логарифма на уровне машинной независимо от вида матрицы. Библиотечный алгоритм на некоторых матрицах дает точность хуже до 10-15 раз в зависимости от матрицы. Лучшую точность встроенный не смог продемонстрировать ни на одной матрице!

```
AA =  np.array([[1, 2], [3, 4]])

for q in range(2000):
  A = AA + q*np.array([[1, 0], [0, 1]])*0.01
  if q % 100 == 0:
    print('точность встроенного метода', np.linalg.norm(logm(expm(A))-A, 'fro')/np.linalg.norm(A, 'fro'), end = ' | ')
    print('точность аналитического метода', np.linalg.norm(matrix_log_analytic(expm(A))-A, 'fro')/np.linalg.norm(A, 'fro'))
```

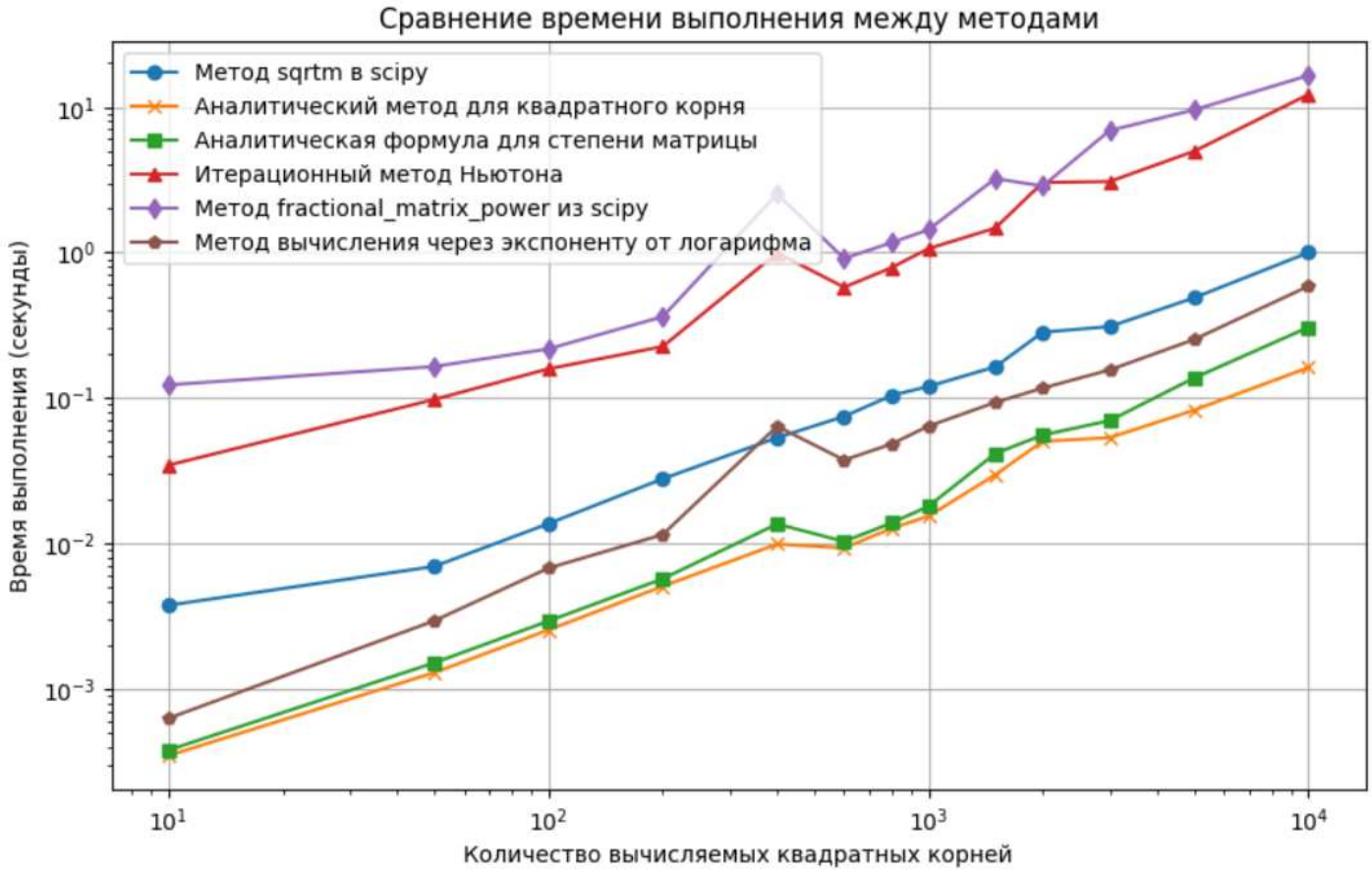
```
точность встроенного метода 3.783890250755347e-15 | точность аналитического метода 3.3674731643402955e-16
точность встроенного метода 6.044928789819412e-15 | точность аналитического метода 1.3896279205500544e-15
точность встроенного метода 2.762433558681622e-15 | точность аналитического метода 1.5427844197272194e-16
точность встроенного метода 1.2316818592266832e-15 | точность аналитического метода 1.2316818592266832e-16
точность встроенного метода 3.473461024916715e-15 | точность аналитического метода 1.1047673502100373e-15
точность встроенного метода 2.1475107019845614e-15 | точность аналитического метода 4.529676449456192e-16
точность встроенного метода 7.707661349566876e-16 | точность аналитического метода 3.006498163255289e-16
точность встроенного метода 1.7713031823906393e-15 | точность аналитического метода 5.290427728586987e-16
точность встроенного метода 4.250206091619259e-16 | точность аналитического метода 1.3191415199864766e-16
точность встроенного метода 1.949958342364329e-15 | точность аналитического метода 7.237466655017797e-16
точность встроенного метода 1.6544208329073209e-15 | точность аналитического метода 4.3867328517029085e-16
точность встроенного метода 1.3621582844854534e-15 | точность аналитического метода 1.181522192307309e-15
точность встроенного метода 5.171617404750989e-16 | точность аналитического метода 2.2853996708612937e-16
точность встроенного метода 8.848280553651172e-16 | точность аналитического метода 7.885066783010756e-16
точность встроенного метода 3.2875882652459006e-16 | точность аналитического метода 3.41841023485266e-16
точность встроенного метода 1.216992480482259e-15 | точность аналитического метода 2.8652181583621774e-16
точность встроенного метода 1.0707751022501119e-15 | точность аналитического метода 4.2732504141856975e-16
точность встроенного метода 3.7575781364353835e-16 | точность аналитического метода 1.9369182016661636e-16
точность встроенного метода 1.3567149463006938e-15 | точность аналитического метода 4.014075956623856e-16
точность встроенного метода 2.035689575619724e-15 | точность аналитического метода 2.016625634589731e-16
```

Аналитический метод вычисления степени матрицы напрямую немного эффективнее, чем метод, основанный на взятии экспоненты от логарифма.

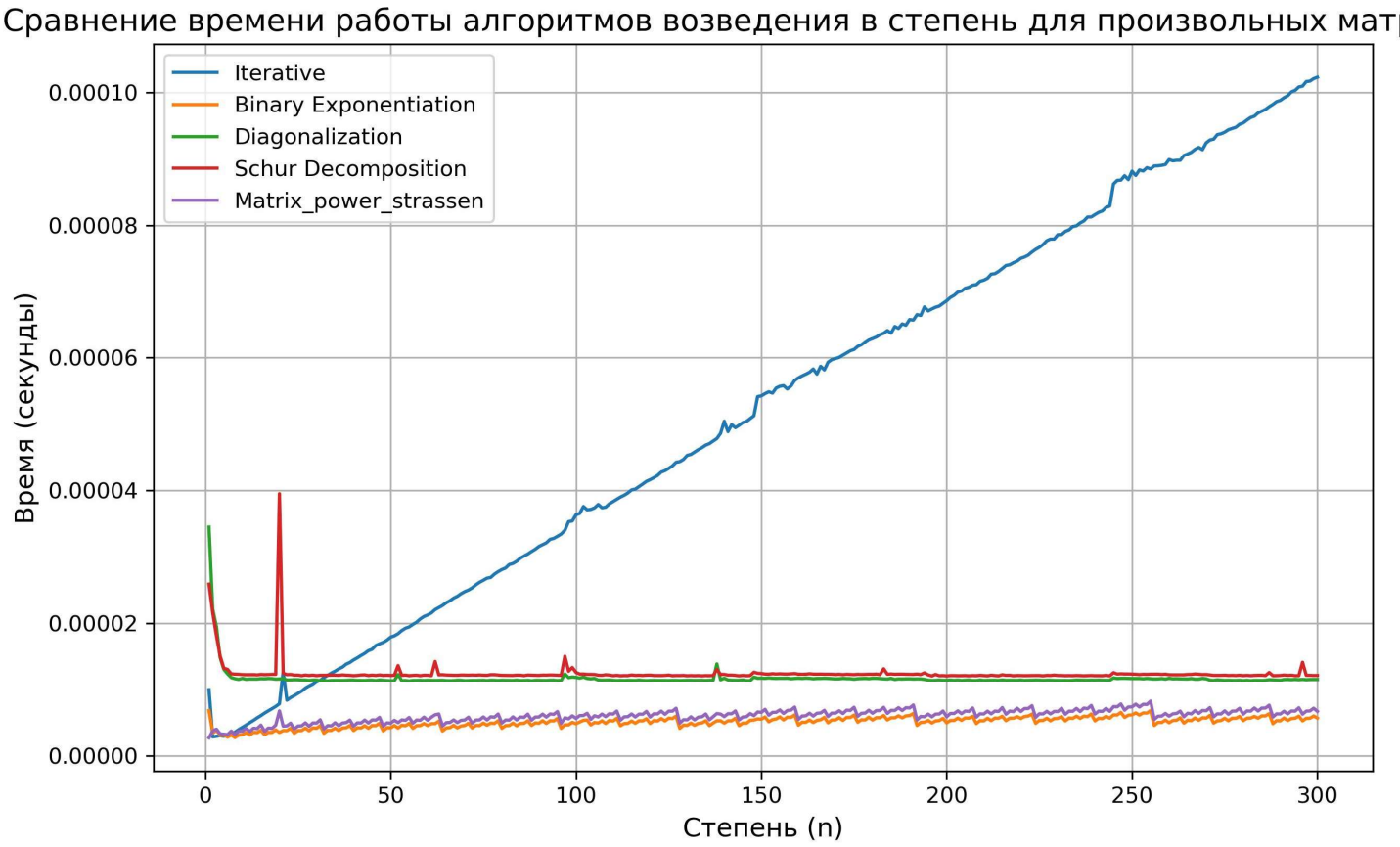


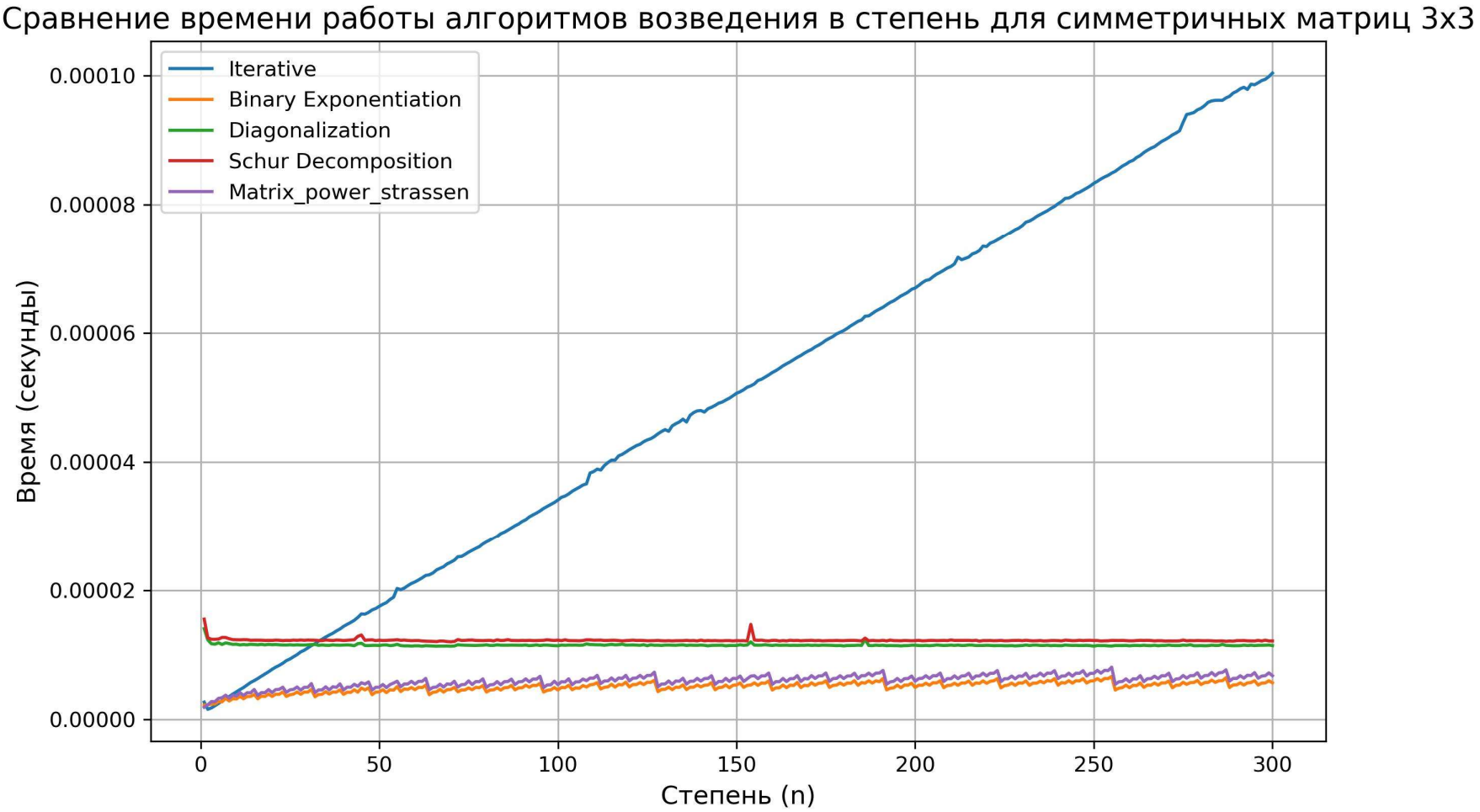

```
Количество степеней: 10, Время выполнения (scipy): 0.002358 секунд, Время выполнения (R): 0.001006 секунд
Количество степеней: 50, Время выполнения (scipy): 0.005264 секунд, Время выполнения (R): 0.002881 секунд
Количество степеней: 100, Время выполнения (scipy): 0.002289 секунд, Время выполнения (R): 0.004295 секунд
Количество степеней: 200, Время выполнения (scipy): 0.005752 секунд, Время выполнения (R): 0.012576 секунд
Количество степеней: 400, Время выполнения (scipy): 0.011579 секунд, Время выполнения (R): 0.015408 секунд
Количество степеней: 600, Время выполнения (scipy): 0.013408 секунд, Время выполнения (R): 0.025548 секунд
Количество степеней: 800, Время выполнения (scipy): 0.019123 секунд, Время выполнения (R): 0.072140 секунд
Количество степеней: 1000, Время выполнения (scipy): 0.038724 секунд, Время выполнения (R): 0.079129 секунд
Количество степеней: 1500, Время выполнения (scipy): 0.075830 секунд, Время выполнения (R): 0.125210 секунд
Количество степеней: 2000, Время выполнения (scipy): 0.108295 секунд, Время выполнения (R): 0.172936 секунд
Количество степеней: 3000, Время выполнения (scipy): 0.188663 секунд, Время выполнения (R): 0.300551 секунд
Количество степеней: 5000, Время выполнения (scipy): 0.264247 секунд, Время выполнения (R): 0.330809 секунд
Количество степеней: 10000, Время выполнения (scipy): 0.488558 секунд, Время выполнения (R): 0.487752 секунд
Количество степеней: 50000, Время выполнения (scipy): 1.718347 секунд, Время выполнения (R): 3.047912 секунд
Количество степеней: 100000, Время выполнения (scipy): 3.845439 секунд, Время выполнения (R): 5.513219 секунд
```

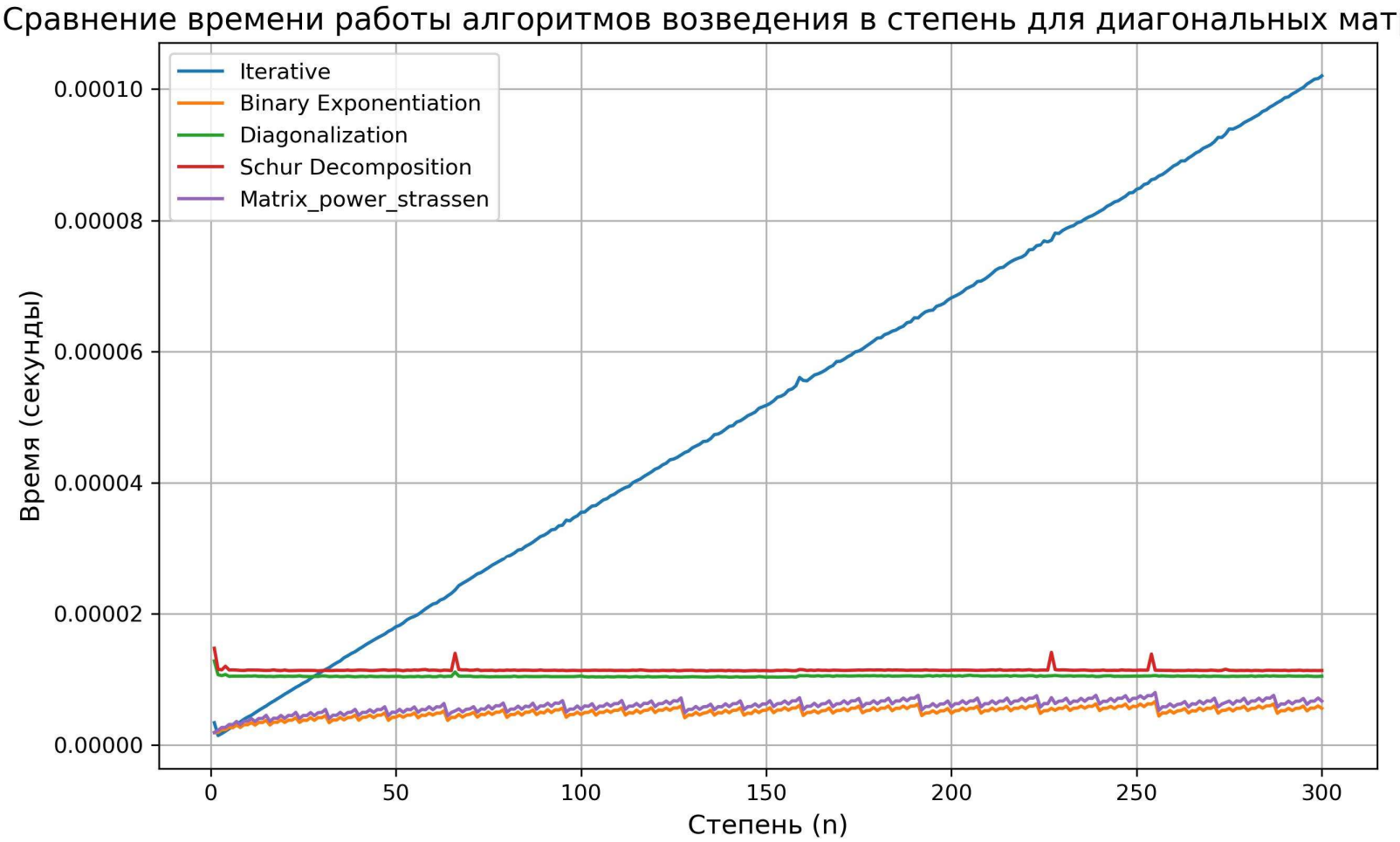
Аналитический метод расчета квадратного корня оказался самым эффективным, однако не сильно превзошел аналитический метод возведения в степень с показателем 0.5



Были сделаны попытки превзойти алгоритм бинарного возведения в натуральную степень, который также реализован в библиотеке numpy, для матриц 3 на 3 разными методами. Этот алгоритм всё равно оказался лучше прочих методов, как и было в матрицах 2 на 2.




Сравнение времени работы алгоритмов возведения в степень для симметричных матриц 3x3
Iterative
Binary Exponentiation
Diagonalization
Schur Decomposition
Matrix_power_strassen
Время (секунды)
0.00010
0.00008
0.00006
0.00004
0.00002
0.00000
0
50
100
150
200
250
300
Степень (n)


Сравнение времени работы алгоритмов возведения в степень для диагональных матриц 3x3
Iterative
Binary Exponentiation
Diagonalization
Schur Decomposition
Matrix_power_strassen
Время (секунды)
0.00010
0.00008
0.00006
0.00004
0.00002
0.00000
0
50
100
150
200
250
300
Степень (n)

Формула Родригеса: Матричная экспонента для кососимметрических матриц 3x3

Кососимметрическая матрица A размера 3x3 имеет вид:

$$\begin{pmatrix} 0 & -c & b \\ c & 0 & -a \\ -b & a & 0 \end{pmatrix}$$

где a, b, c - вещественные числа. Матричная экспонента матрицы A:

$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{A^k}{k!}$$

Положим:

$$\theta = \sqrt{a^2 + b^2 + c^2}$$

Тогда матричную экспоненту можно найти по формуле Родригеса:

$$e^A = I_3 + \frac{\sin\theta}{\theta} A + \frac{1 - cos\theta}{\theta^2} A^2$$

Сравнение точности и скорости алгоритмов

Кастомная имплементация матричной экспоненты через формулу Родригеса сравнивалась с реализацией из библиотеки Scipy: scipy.linalg.expm.

Сравнение точности и скорости реализаций производилось на 1_000_000 сгенерированных кососимметрических матриц размера 3 x 3. Матричные экспоненты, получаемые с помощью реализации через формулу Родригеса, были неотличимы от полученных благодаря функции из Scipy вплоть до машинной точности,но на их вычисление понадобилось меньше времени:

Матричный логарифм от матрицы вращения

Пусть A - кососимметрическая матрица размера 3x3, тогда:

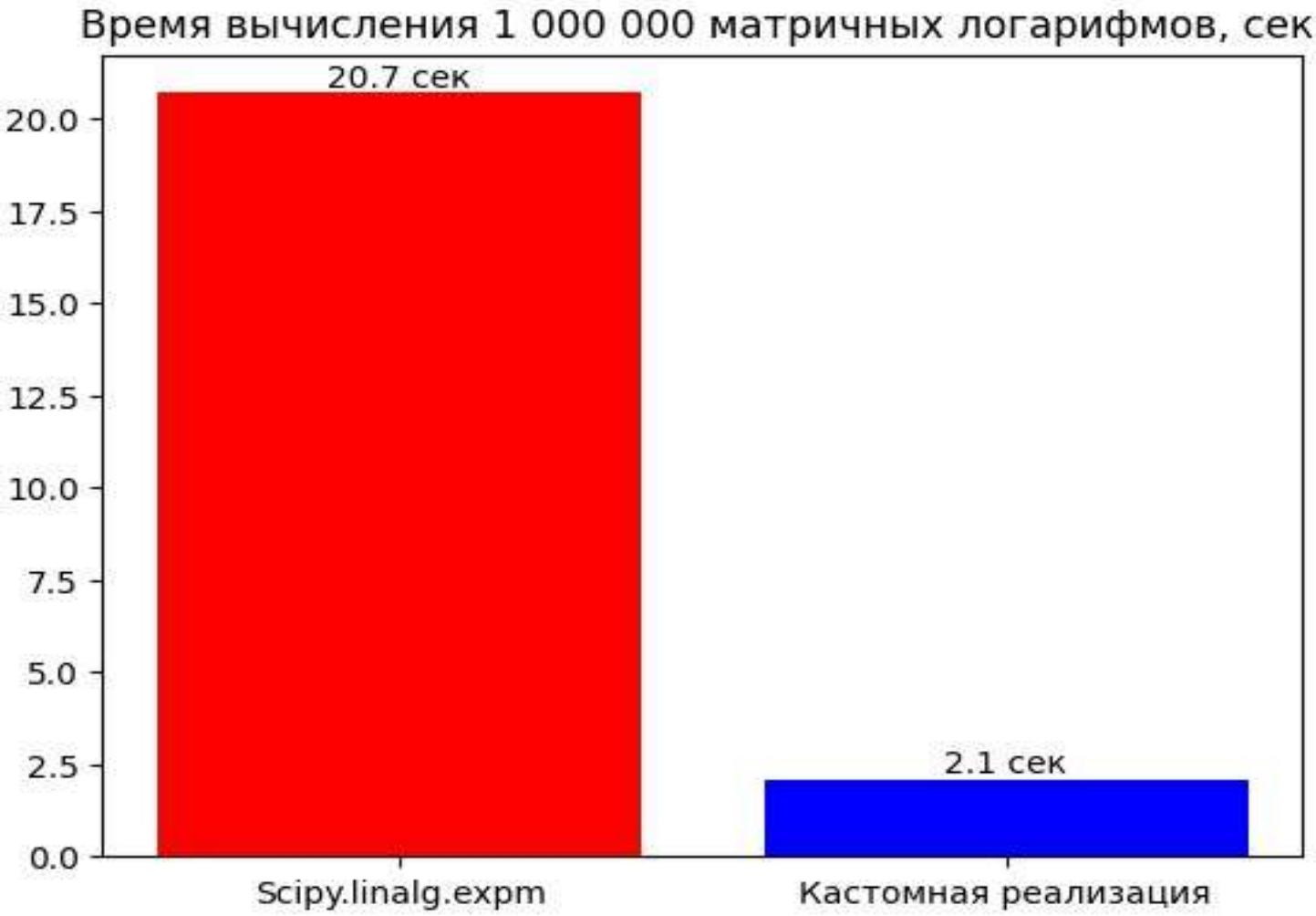
$$e^A = R$$

Причём для любой матрицы вращения размера 3x3 существует такая кососимметрическая матрица, что верно выражение выше.

Для матрицы вращения её матричный логарифм (кососимметрическая матрица A) может быть найден по формуле:

$$A = \log R = \frac{\theta}{2\sin\theta}(R - R^T)$$

$$tr(R) = 1 + 2\cos\theta$$


Время вычисления 1 000 000 матричных логарифмов, сек.
20.7 сек
2.1 сек
20.0
17.5
15.0
12.5
10.0
7.5
5.0
2.5
0.0
Scipy.linalg.expm
Кастомная реализация

Матричная экспонента для симметрических матриц 3x3

Пусть $\phi_A(\lambda)$ - характеристический многочлен симметрической матрицы A 3 степени. По теореме Гамильтона-Кэли знаем, что:

$$\phi_A(A) = 0$$

Каждое слагаемое из ряда для матричный экспоненты можем представить как:

$$\frac{A^k}{k!} = Q_k \phi_A(A) + R_k$$

где deg(R_k) <= 2.Тогда:

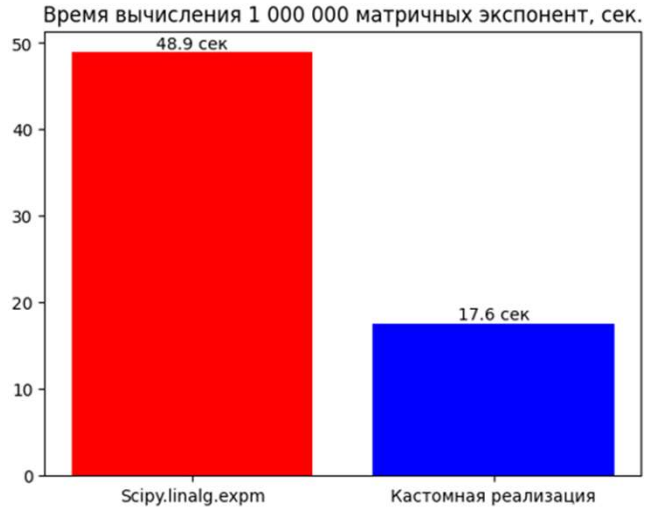
$$e^A = \sum_{k=0}^{\infty} Q_k \phi_A(A) + R_k = \sum_{k=0}^{\infty} R_k = xA^2 + yA + z$$

где x, y, z - вещественные числа, вычисляемые на основе собственных чисел A

Сравнение точности и скорости алгоритмов

Кастомная имплементация матричной экспоненты для симметрических снова сравнивалась с реализацией из библиотеки Scipy: scipy.linalg.expm.

Аналогично экспериментах с кососимметрическими матрицами сравнение точности и скорости реализаций производилось на 1_000_000 сгенерированных симметрических матриц размера 3 x 3. Вычисления с помощью кастомного алгоритма снова получились быстрее:



Выводы

- Мы сумели превзойти библиотечные реализации матричных функций от маленьких матриц.
- Было проведено множество сравнений методов и проверены гипотезы.

Удалось

- Ускорить вычисление дробной отрицательной степени матрицы в несколько сотен раз по сравнению с библиотечной реализацией. Для дробной положительной – в десятки раз. Встроенный метод sqrtm в scipy для вычисления квадратного корня удалось обогнать приблизительно в 7 раз при той же точности.
- Был рассмотрен как перспективный метод алгоритм вычисления экспоненты через предел. Для ряда приложений, в которых используют аппроксимации Паде не выше 8-го порядка, он актуален.
- Было показано превосходство аналитических методов во всех случаях, кроме возведения матриц в целую степень (для них лучше всего работает стандартный алгоритм).
- Показано, что для маленьких матриц ряд Тейлора быстрее работает при той же точности, чем аппроксимация Паде. С ростом размера матриц аппроксимации Паде начинают обгонять ряд Тейлора.
- Среди разных аналитических подходов были найдены самые лучшие.
- Для симметричных и кососимметричных матриц размера 3 на 3 реализовали алгоритмы вычисления экспоненты на основе научных статей, которые работают значительно лучше, чем алгоритмы scipy.

Для развития проекта следует:

- Продолжить исследование матриц 3 на 3. Сделать намного больше разных тестов для 2 на 2. Также обобщить на матрицы чуть большего размера.
- Разобрать множество случаев матриц специального вида.
- Написать собственный сверхбыстрый движок геометрической алгебры. Почти все известные используют библиотечные матричные функции и поэтому работают неэффективно.

Ссылки

- https://github.com/IgorOberon/NLA-project-small-matrix
- https://bivector.net/lib.html - библиотеки геометрической алгебры для разных приложений в компьютерной графике и робототехнике. Все используют для вычисления матричных функций обычные библиотеки, реализующие те же самые методы, что и scipy.
- https://github.com/numpy/numpy/blob/v2.1.0/numpy/linalg/_linalg.py - здесь можно прочитать про детали реализации матричных функций в numpy.
- https://github.com/scipy/scipy/blob/main/scipy/linalg/_matfuncs.py – здесь можно прочитать про детали реализации матричных функций в scipy.