Sprawozdanie
Obliczenia Naukowe, lista nr. 5

Łukasz Klekowski 229738

12.01.2018

1 Zadanie 1.

1.1 Opis problemu

Zadanie polegało na napisaniu funkcji rozwiązującej układ Ax = b metodą eliminacji Gaussa, która uwzględnia specyficzną postać macierzy A dla dwóch wariantów:

1. bez wyboru elementu głównego,
2. z częściowym wyborem elemntu głównego.

Macierz $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $n \geqslant 4$ jest macierzą rzadką i blokową o następującej strukturze:

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

gdzie v=n/l, l jest dzielnikiem n, oraz $l \geqslant 2$, gdzie l jest rozmiarem wszystkich kwadratowych macierzy wewnętrznych $\mathbf{A_k}$ $\mathbf{B_k}$ $\mathbf{C_k}$. $\mathbf{A_k}$ jest kwadratową macierzą gęstą, $\mathbf{0}$ jest kwadratową macierzą zerową, Bk jest macierzą o następującej postaci,

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

a $\mathbf{C_k}$ jest macierzą diagonalną:

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

Funkcja ta ma znajdować się w module. Dodatkowo program powinien umożliwiać:

- czytanie danej macierzy A i wektora prawych stron b z plików tekstowych,
- czytanie macierzy A z pliku tekstowego oraz obliczanie prawych stron b na podstawie wektora x,

- drukowanie obliczonego rozwiązania x do pliku tekstowego jeśli macierz A i wektor prawych stron b były czytane z plików
- drukowanie obliczonego błędu względnego oraz rozwiązania x do pliku tekstowego , jeśli macierz A była czytana z pliku, a wektor prawych stron był obliczany,
- testowanie rozwiązania $Ax = b$.

1.2 Rozwiązanie problemu

Metoda eliminacji Gaussa dzieli się na 2 etapy.

W pierwszym etapie sprowadzamy macierz powstałą ze współczynników równań do postaci schodkowej. Aby to uzyskać możemy mnożyć wiersze przez stałe, dodawać je ze sobą, oraz zamieniać wiersze ze sobą (to dzieje się w algorytmie z możliwością wyboru elementu głównego).

W podstawowym algorytmie przechodzimy przez macierz kolumnami. Zaczynamy od pierwszej kolumny i drugiego wiersza. Naszym zadaniem jest wyzerowanie macierzy pod przekątną, więc na początku obliczamy współczynnik

$$l = \frac{a_{m,k}}{a_{k,k}}$$

gdzie $m > k$ przez jaki mamy pomnożyć wartość z wiersza k-tego aby wyzerować wartość z wiersza pod nim. Po obliczeniu odejmujemy odpowiednie wiersze ze sobą pomnożone przez obliczony współczynnik. Po wyzerowaniu całej kolumny przechodzimy do kolejnej, oraz do kolejnego wiersza.

Ten algorytm nie działa gdy elementy przekątniowe macierzy nie są różne od zera. Podczas obliczania współczynnika możemy trafić na dzielenie przez zero. W pierwszej wersji algorytmu zwracany wtedy jest błąd, lecz układ równań ciągle nie jest rozwiązany. Aby temu zapobiec wybieramy element główny. W każdym kroku zerowania kolumn, szukamy od k-tego do n-tego wiersza, wiersza gdzie:

$$a_{m,k} = max\{|a_{i,k}| : k \geqslant i \geqslant n\}$$

Po znalezieniu odpowiedniego wiersza następuje zamiana z k-tym wierszem.

W drugim etapie dzięki uzyskanej macierzy trójkątnej obliczamy x wiedząc że:

$$x_n = \frac{b_n}{a_{n,n}}.$$

Kolejne wartości obliczamy ogólnym wzorem dla i-tej składowej wektora x:

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

Ponieważ macierz przedstawiona w zadaniu jest macierzą rzadką, do jej przetrzymywania używam *Sparce Matrix*. Jest to struktura w Julii, która jest przystosowana do przechowywania takich macierzy, ponieważ pamięta tylko elementy niezerowe.

Powyższy algorytm zmodyfikowałem, aby nie przechodził przez całą macierz, lecz tylko przez niezerowe elementy, które znajdują się na skosie macierzy.

1.3 Wynik eksperymentu, analiza złożoności, oraz wnioski

Zwykły algorytm Gaussa ma złożoność $O(n^3)$. Zmodyfikowałem go, aby przechodził tylko przez przekątną macierzy. Główna pętla przechodzi n-1 razy, a częściowy wybór elementu głównego oraz zerowanie macierzy ma złożoność $O(2l * 2l)$. Złożoność całego algorytmu wynosi więc $O(n * 2l * 2l) = O(n * 4l^2)$, więc gdy l jest stałą złożoność algorytmu wynosi $O(n)$.

Tabela 1: Wyniki testów.

	Bez wyboru	Z wyborem
8x8	err = 1	2.419674984566563e-16
16x16	8.825225603406398e-16	2.5286532809710436e-16
10000x10000	1.1014154952814785e-14	5.351056154328426e-16
50000x50000	1.9325998336383816e-13	5.215335731934636e-16

Z otrzymanych wyników widać że wybór elementu głównego zwiększa dokładność obliczeń. Druga wersja algorytmu chroni także przed dzieleniem przez zero co widać w macierzy 8×8, gdzie w przypadku bez wyboru funkcja zwróciła błąd.