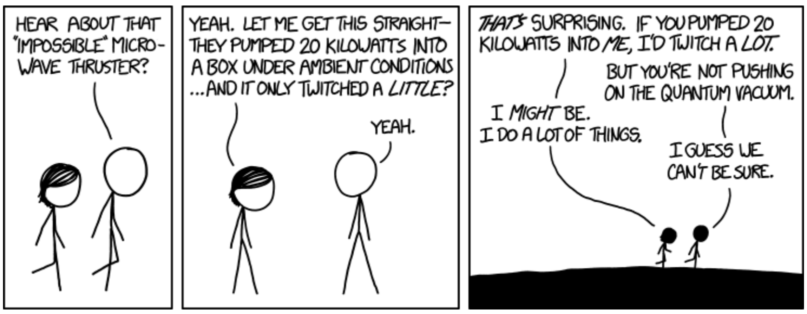
FYS3150 Computational Physics 2014

Oblig 1

Løysning av lineære likningar på matriseform.

Øyvind Sigmundson Schøyen

8. september 2014



Figur 1: xkcd.com/1404/

Innhold

1 Introduksjon **3**

2 Omforming av differensiallikning til ei matriselikning **3**
2.1 Utleiing av eksakt løysning 4

3 Algoritma **5**
3.1 Dekomponering 5
3.2 Forward Substitution 5
3.3 Backward Substitution 6
3.4 Antal FLOPS 6
3.5 Køyretid 6

4 Programma **8**
4.1 `Plotter.py` 8
4.2 `Project1.cpp` 8

5 Resultat **10**
5.1 Plott over løysningar 10
5.2 Feilestimat 13

1 Introduksjon

I dette prosjektet har me tatt for oss ein ein-dimensjonal Poisson likning med Dirichlet randpunkt. Me vil simulere ei numerisk løysning på ei andreordens differensiallikning. Måten me vil gjer dette på er ved å omforme settet med lineære likningar til ei matriselikning. Då kan me bruke radoperasjoner til å lage ei algoritme som gjer det mogleg for oss å løyse likningssettet. Denne matriselikninga vil gje oss ei tridiagonalmatrise A som stort sett består av nullar. Hensikta er då å sjå at me kan 'kaste' alle nullane og kun behalde elementa frå diagonalane. Me vil representere desse som vektorar for å bruke minst mogleg plass. Dette vil og gjere det mogleg for oss å kunne utføre fleire iterasjoner. Ein vanleg PC vil ikkje kunne klare å representere ei stort større matrise enn 1000×1000. Dette fordi han ikkje har stort nok minne. Viss me derimot bruker vektorar vil me kunne ha ei 'matrise' (tre vektorar) som er mykje større. I tillegg vil radreduksjonen gå fleirfoldige mange gonger kjappare. Alt av programkode ligg på `https://github.com/Schoyen/FYS3150/tree/master/Oblig1`

2 Omforming av differensiallikning til ei matriselikning

Me er interesserte i å forme om uttrykket for tilnærminga til den andrederiverte. Me startar med å fjerne brøken. Då får me

$$
\begin{aligned}
&-\frac{v_{i+1} + v_{i-1} - 2v_i}{h^2} = f_i \\
\Rightarrow \quad & -v_{i+1} + v_{i-1} - 2v_i = h^2 f_i = \tilde{b}_i, \ \forall \ i \in [1, n].
\end{aligned}
$$

Me er no interesserte i å skrive dette om til vektorar og ei matrise. Me kan då skrive det som

$$
\begin{aligned}
&(2, -1) \cdot (v_1, v_2) = \tilde{b}_1, \\
&(-1, 2, -1) \cdot (v_1, v_2, v_3) = \tilde{b}_2, \\
&(-1, 2, -1) \cdot (v_2, v_3, v_4) = \tilde{b}_3, \\
&\dots \\
&(-1, 2, -1) \cdot (-v_{i+1}, -v_{i-1}, v_i) = \tilde{b}_i, \\
&\dots \\
&(-1, 2) \cdot (v_{n-1}, v_n) = \tilde{b}_n.
\end{aligned}
$$

Det kjem fram frå dette uttrykket at koeffisientane står i ro. Viss me no setter koeffisientane i ei matrise vil me kun trenge ein vektor $\mathbf{v}$ beståande av alle $v_i, \ \forall \ i \in [1, n]$ kor dei vil få dei rette koeffisientane i eit matriseprodukt.

Me setter opp matriselikninga.

$$A\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \\ v_3 \\ \dots \\ v_{n-1} \\ v_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{b}_1 \\ \tilde{b}_2 \\ \tilde{b}_3 \\ \dots \\ \tilde{b}_{n-1} \\ \tilde{b}_n \end{pmatrix} = \tilde{\mathbf{b}}$$

Eit matriseprodukt av dette uttrykket vil gje oss

$$\begin{aligned} &2v_1 - v_2 = \tilde{b}_1 \\ &- v_1 + 2v_2 - v_3 = \tilde{b}_2 \\ &\dots \\ &- v_{i-1} + 2v_i - v_{i+1} = \tilde{b}_i \\ &\dots \\ &- v_{n-2} + 2v_{n-1} - v_n = \tilde{b}_{n-1} \\ &- v_{n-1} + 2v_n = \tilde{b}_n. \end{aligned}$$

Dette fordi koeffisientane er omringa av nullar som automatisk vil fjerne resten av ledda frå $\mathbf{v}$.

2.1 Utleiing av eksakt løysning

For å sjå at den eksakte løysninga er riktig treng me berre å derivere uttrykket to gonger for å sjå at det vert det same som uttrykket til f.

$$\begin{aligned} &u(x) = 1 - x - xe^{-10} - e^{-10x}, \\ &\frac{du(x)}{dx} = -1 - e^{-10} + 10e^{-10x}, \\ &\frac{d^2u(x)}{dx^2} = -100e^{-10x} = f(x). \end{aligned}$$

3 Algoritma

For å løyse ei matriselikning bruker me radoperasjoner på matrisa. Desse vil igjen bli utførde på løysningsvektoren (her kalla $\tilde{\mathbf{b}}$). Målet med likninga er å omforme matrisa til ei spesiell øvre- og nedrematrise som me kan løyse.

3.1 Dekomponering

I den fyrste matrisa vil me fjerne alle verdiar over diagonalen slik at me står igjen med λ_i og $a_i,\ \forall\ i \in [1,n]$. I den andre vil me kun ha einarar på diagonalen og $\gamma_i,\ \forall\ i \in [1,n-1]$ over.

$$
A = \begin{pmatrix}
b_1 & c_1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\
a_2 & b_2 & c_2 & \dots & \dots & \dots \\
\dots & a_3 & b_3 & c_3 & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & a_n & b_n
\end{pmatrix} = LU
$$

$$
= \begin{pmatrix}
\lambda_1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
a_2 & \lambda_2 & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & a_3 & \lambda_3 & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & a_{n-1} & \lambda_{n-1} & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & a_n & \lambda_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
1 & \gamma_1 & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & 1 & \lambda_2 & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & 1 & \gamma_3 & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
\dots & \dots & \dots & \dots & 1 & \gamma_{n-1} \\
\dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1
\end{pmatrix}.
$$

Multiplikasjon av matrisene LU vil gje oss A. Me bruker dette til å finne eit uttrykk for $\gamma_i,\ \forall\ i \in [1,n-1]$ og $\lambda_i,\ \forall\ i\ \in [1,n]$. Det vil gje oss

$$
\begin{aligned}
&\lambda_1 = b_1, \qquad \gamma_1 = \frac{c_1}{\lambda_1}, \\
&\lambda_2 = b_2 - a_2\gamma_1, \qquad \gamma_2 = \frac{c_2}{\lambda_2} \\
&\dots \\
&\lambda_i = b_i - a_i\gamma_{i-1}, \qquad \gamma_i = \frac{c_i}{\lambda_i}, \\
&\dots \\
&\lambda_n = b_n - a_n\gamma_{n-1}, \qquad \gamma_n = \frac{c_n}{\lambda_n}.
\end{aligned}
$$

3.2 Forward Substitution

No gjenstår det å løyse likningane $L\mathbf{y} = \tilde{\mathbf{b}}$ og $U\mathbf{v} = \mathbf{y}$. I programmet vil dette bli gjort litt annleis. Der vil me løyse $L\mathbf{v} = \tilde{\mathbf{b}}$ og $U\mathbf{v} = \mathbf{v}$. Dette for å spare plass i minnet, men det kjem me til. Likninga $L\mathbf{y} = \tilde{\mathbf{b}}$ vil gje oss likningssetta under.

$$
\begin{aligned}
\lambda_1 y_1 = \tilde{b}_1 &\qquad \Rightarrow \qquad y_1 = \frac{\tilde{b}_1}{\lambda_1}, \\
a_2 y_1 + \lambda_2 y_2 = \tilde{b}_2 &\qquad \Rightarrow \qquad y_2 = \frac{\tilde{b}_2 - a_2 y_1}{\lambda_2}, \\
&\qquad \dots \\
a_i y_{i-1} + \lambda_i y_i = \tilde{b}_i &\qquad \Rightarrow \qquad y_i = \frac{\tilde{b}_i - a_i y_{i-1}}{\lambda_i}, \\
&\qquad \dots \\
a_n y_{n-1} + \lambda_n y_n = \tilde{b}_n &\qquad \Rightarrow \qquad y_n = \frac{\tilde{b}_n - a_n y_{n-1}}{\lambda_n}.
\end{aligned}
$$

3.3 Backward Substitution

Til slutt bruker me backward substitution til å finne den endelege løysninga. Me må då løyse likninga $U\mathbf{v} = \mathbf{y}$. Denne likninga må me løyse baklengs. Me får

$$
\begin{aligned}
&\qquad v_n = y_n, \\
v_{n-1} + \gamma_{n-1} v_n = y_{n-1} &\qquad \Rightarrow \qquad v_{n-1} = y_{n-1} - \gamma_{n-1} v_n, \\
&\qquad \dots \\
v_i + \gamma_i v_{n+1} = y_i &\qquad \Rightarrow \qquad v_i = y_i - \gamma_i v_{i+1}, \\
&\qquad \dots \\
v_1 + \gamma_1 v_2 = y_1 &\qquad \Rightarrow \qquad v_1 = y_1 - \gamma_1 v_2.
\end{aligned}
$$

3.4 Antal FLOPS

For å finne ut kor mange flyttalsoperasjoner (FLOPS) me treng kan me telje kor mange aritmetiske operasjoner me gjer per iterasjon. I løkka (eg har ikkje rekna med startverdiar og dei fyrste operasjonane utanfor løkka) har me 6 FLOPS i Forward Substitutionen (eg har her rekna divisjon som ein FLOP) medan me i Backward Substitutionen har 2 FLOPS. Det gjer oss 8 FLOPS per iterasjon og totalt $8n$ FLOPS, kor n er antal iterasjoner.

3.5 Køyretid

Idet ein køyrer programmet `Plotter.py` vil me få ut køyretidene (tida er kun tatt frå for-løkka i programmet).

```
Duration of Gaussian Elimination with n = 10: 107000ns
Duration of Gaussian Elimination with n = 100: 1146000ns
```

```
Duration of Gaussian Elimination with n = 1000: 332022000ns
Duration of TDMA with n = 10: 2000ns
Duration of TDMA with n = 100: 7000ns
Duration of TDMA with n = 1000: 60000ns
Duration of TDMA with n = 10000: 923000ns
Duration of TDMA with n = 100000: 6917000ns
Duration of TDMA with n = 1000000: 59471000ns
```

Desse køyretidene vil variere veldig med dagsformen til pc'en som køyrer programmet samt hardwaren pc'en i seg sjølv. Hovudpoenget er å sjå skjelnaden på dei to algoritmane. Køyretiden er gjeve ved $\mathcal{O}(8n)$.

4 Programma

Alle algoritmar og tung utrekning vert gjennomført i C++. Programmet skriv ut resultata til fil, kor desse vert henta av eit program i Python som plottar resultata. Sjølve køyringa av programmet vert styrt i Python. Ein treng difor kun å køyre programmet `Plotter.py` for å få ut all informasjon.

4.1 `Plotter.py`

Python-programmet står for sjølve gjennomføringa av heile prosjektet. Eit kall på programmet køyrer C++ programmet for forskjellige verdiar av n samt dei forskjellige metodane. C++ skriv ut resultata til filer som Python tar imot. Python les verdiane og lagrar dei i arrays i klassa Plotter. Desse vert deretter plotta.

4.2 `Project1.cpp`

C++-programmet tek imot n-verdiar og kva løysningsmetode som skal nyttast frå kommandolinja. Algoritmane vert implementerte i eigne funksjonar.

comment: Startverdier for TDMA-algoritma
$\lambda_1 = b_1$
$v_1 = \frac{\tilde{b}_1}{\lambda_1}$
$\gamma_1 = \frac{c_1}{\lambda_1}$
comment: Forward sweep
for $i = 2$ to $i < n + 1$ step 1
    $\lambda_i = b_i - \gamma_{i-1} a_i$
    $\gamma_i = \frac{c_i}{\lambda_i}$
    $v_i = \frac{\tilde{b}_i - a_i v_{i-1}}{\lambda_i}$
od
comment: Backward sweep
for $i = n$ to $i > 0$ step -1
    $v_i = \gamma_i v_{i+1} - v_i$
od

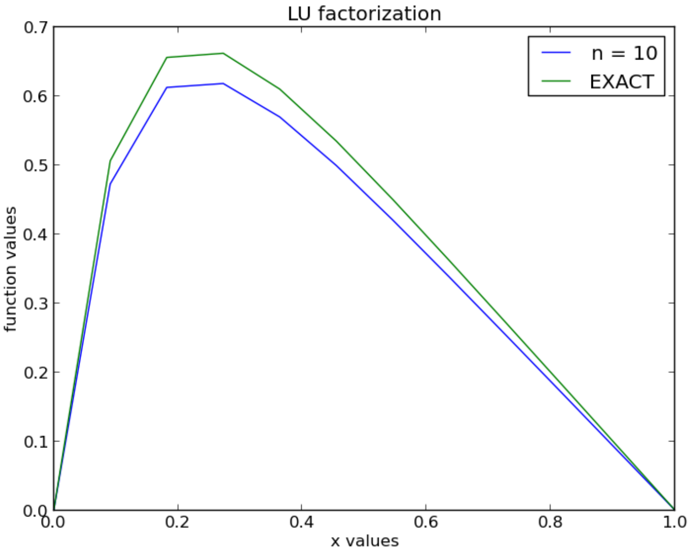
comment: Startverdiar for LU-algoritma frå Armadillo-biblioteket
$lu(L, U, P, A)$
comment: Forward sweep
for $i = 1$ to $i < n + 1$ step 1
    $y_i = \tilde{b}_i$
    for $j = 1$ to $j < i$ step 1
        $y_i = L_{i-1,j-1} y_j - y_i$

```
    od
    y_i = L_{i-1,i-1} / y_i
od
comment: Backward sweep
for i = n to i > 0 step -1
    v_i = y_i
    for j = i + 1 to j < n + 1 step 1
        v_i = U_{i-1,j-1} v_j - v_i
    od
    v_i = U_{i-1,i-1} / v_i
od
```

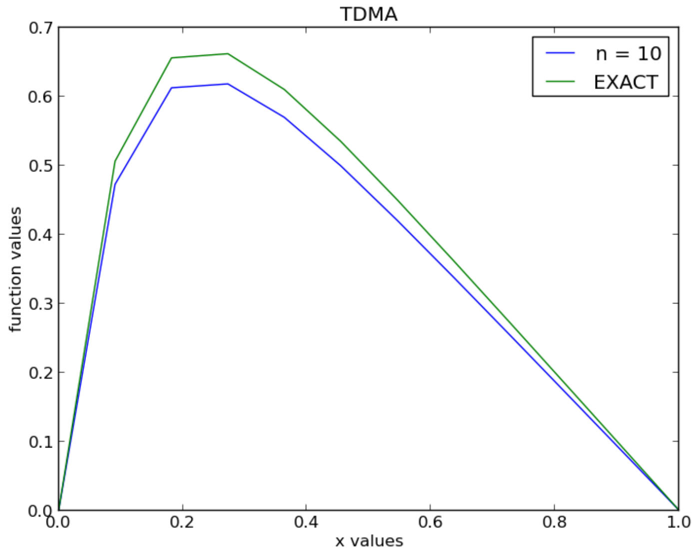
5 Resultat

Metoden som vert nytta til å løyse likningssettet er veldig sterk. Allerede for $n = 100$ vil den numeriske løysninga ligge heilt på den eksakte løysninga.

5.1 Plott over løysningar

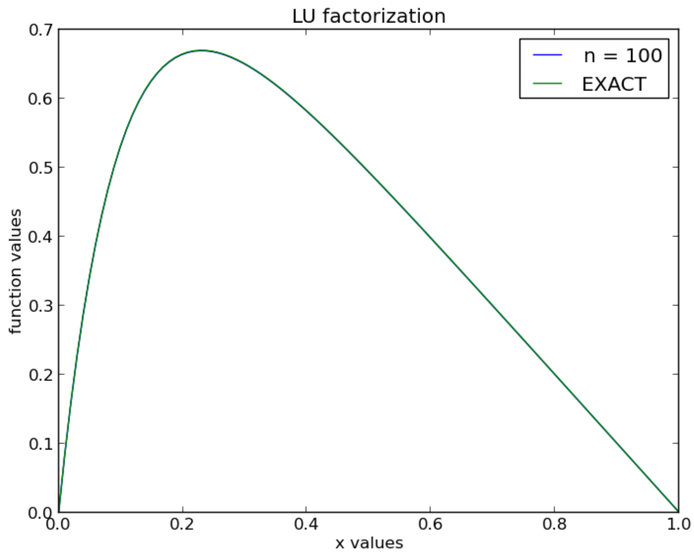


Figur 2: LU for $n = 10$

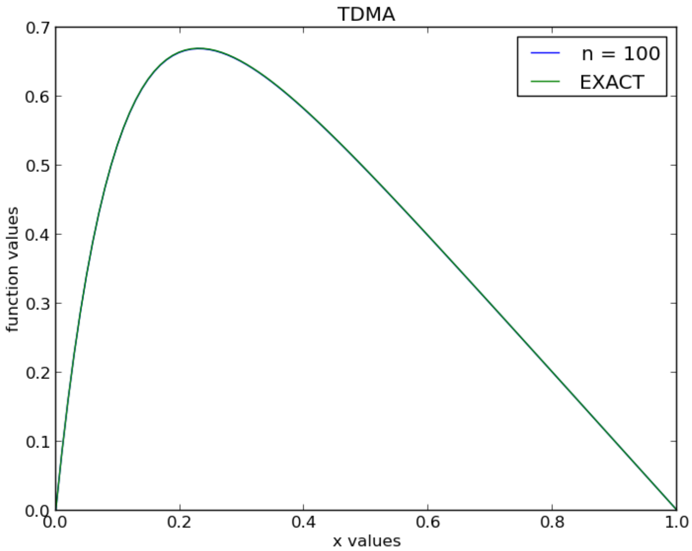


Figur 3: TDMA for $n = 10$

Me kan sjå at løysninga for $n = 10$ er langt i frå eksakt foreløpig.



Figur 4: LU for $n = 100$

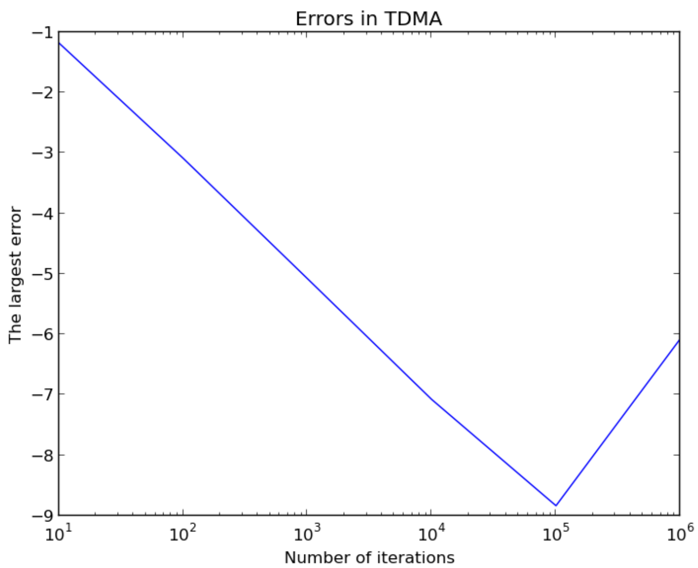


Figur 5: TDMA for $n = 100$

Dei resterande plotta vil bli heilt like då den numeriske løysninga ligg heilt på den eksakte løysninga.

5.2 Feilestimat

Grafen til feilestimatet gjer oss ei tilnærma lineær nedgang. For $n = 1000000$ derimot skjer det noko underleg. Plutseleg stig feilen igjen.



Figur 6: Feilestimat

Dette skjer fordi numerisk avrunding slår inn. PC'en klarer berre å handtere eit visst antal signifikante tal. Når talet overskrid denne grensa vil numerisk avrunding slå inn og feilen vil stige.

Antal iterasjoner	Feil
10	-1.1797
100	-3.08804
1000	-5.08005
10000	-7.07928
100000	-8.83751
1e+06	-6.07526

Det siste leddet viser korleis feilen vil stige etterkvart som me auker antal iterasjoner.