FYS3150 Computational Physics 2014

Oblig 1

Løysning av lineære likningar på matriseform.

Øyvind Sigmundson Schøyen

7. september 2014

Innhold

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 ein 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

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

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 $\mathbf{v}$ bestående 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.

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

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

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

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 verdiana 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
    $\lambda_i = b_i - \gamma_i a_i$
    $\gamma_i = \frac{c_i}{\lambda_i}$
    $v_i = \frac{\tilde{b}_i - a_i v_{i-1}}{\lambda_i}$
od
comment: Backward sweep
for $i = n$ to $i > 0$ step -1
    $v_i = \gamma_i v_{i+1} - v_i$
od

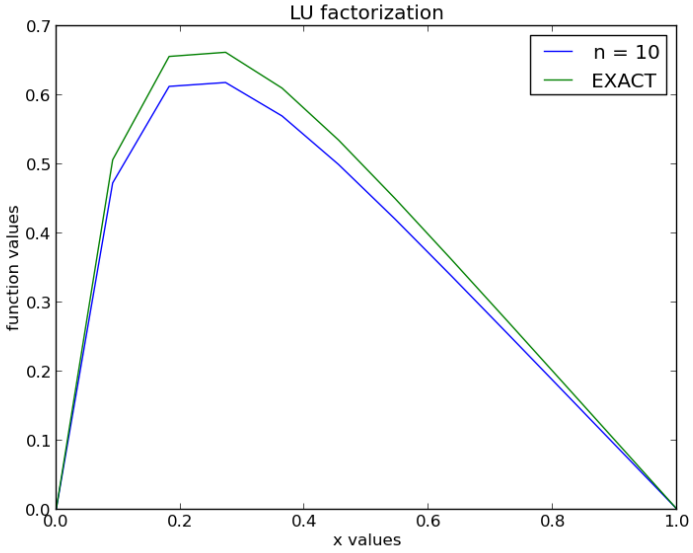
comment: Startverdiar for LU-algoritma frå Armadillo-biblioteket
$lu(L, U, P, A)$
comment: Forward sweep
for $i = 1$ to $i < n + 1$ step 1
    $y_i = \tilde{b}_i$
    for $j = 1$ to $j < i$ step 1
        $y_i = L_{i-1,j-1} y_j - y_i$

```
    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 1: LU for $n = 10$

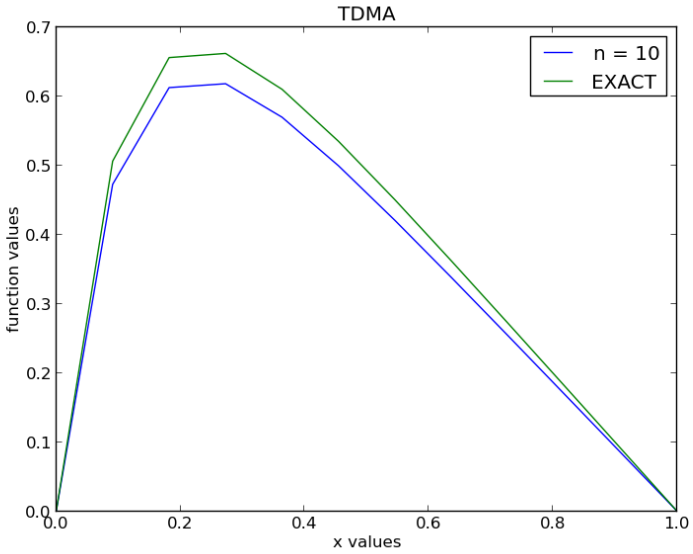
Me kan sjå at løysninga for $n = 10$ er langt i frå eksakt foreløpig.

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

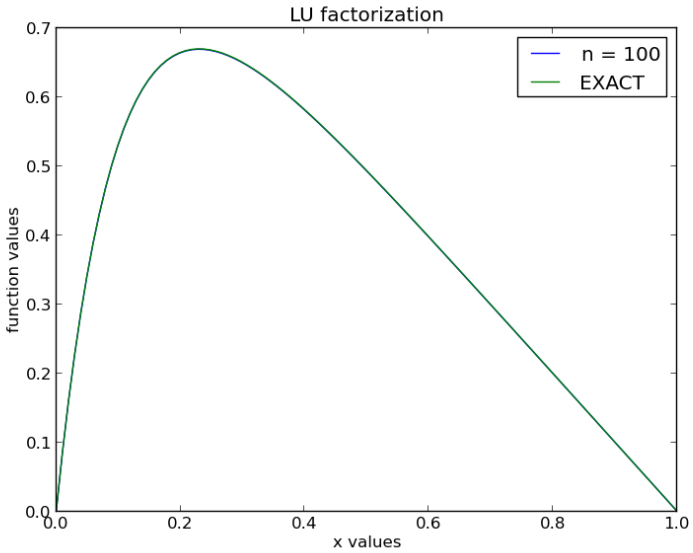
5.2 Feilestimat

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

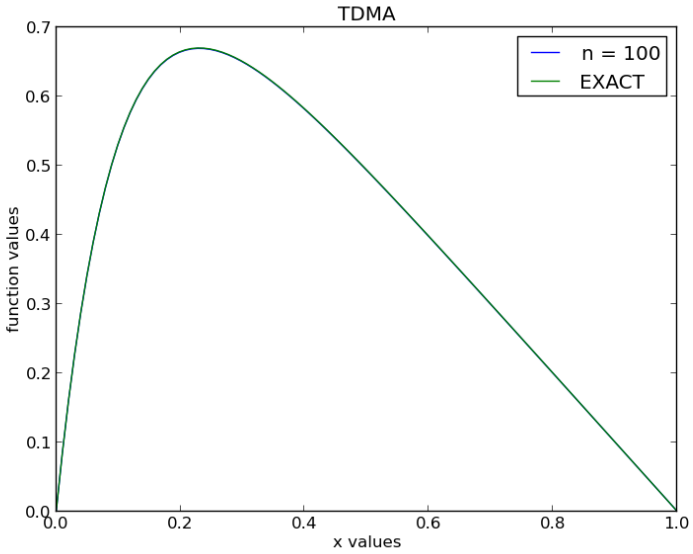
Dette skjer fordi numerisk avrunding slår inn. PC'en klarer berre å håndtere eit visst antal signifikante tal. Når talet overskrid denne grensa vil numerisk avrunding slå inn og feilen vil stige.



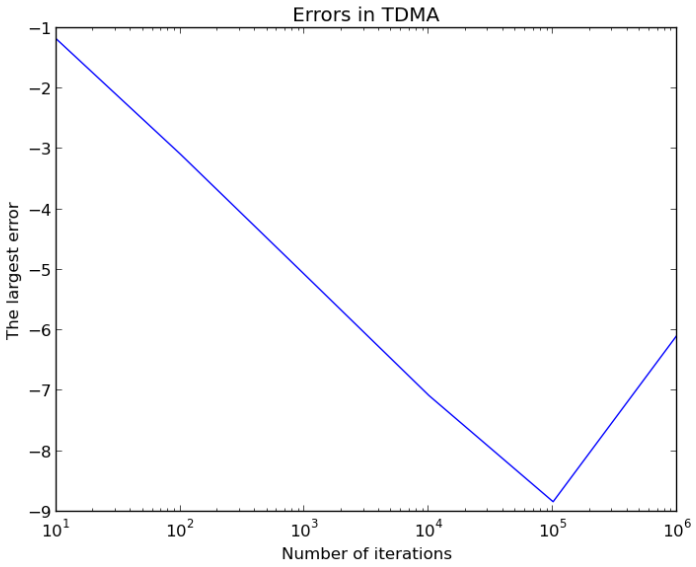
Figur 2: TDMA for $n = 10$



Figur 3: LU for $n = 100$



Figur 4: TDMA for $n = 100$



Figur 5: Feilestimat

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.