

MÁSTER EN MODELIZACIÓN E INVESTIGACIÓN MATEMÁTICA, ESTADÍSTICA Y COMPUTACIÓN

May 20, 2015
EJERCICIOS PROGRAMACIÓN CIENTÍFICA

Programación Científica y Álgebra Computacional



Autor:
Pilar Barbero Iriarte



Universidad de Oviedo

Profesor:
Pedro Alonso Velázquez

Contents

1	Programación Científica	2
---	-------------------------	---

1 Eliminación de Neville

Reorganizar el proceso de eliminación de Neville en términos de operaciones de nivel 3 de BLAS.

El algoritmo de eliminación de Neville es una alternativa a la eliminación Gaussiana que nos permite transformar una matriz cuadrada $n \times n$ en una matriz triangular superior U .

Podemos expresar el algoritmo de eliminación de nivel en términos de operaciones de nivel 2 de la siguiente forma,

```
1: for  $i = 1$  to  $n - 1$  do
2:    $A(n : -1 : i + 1, i) = A(n : -1 : i + 1, i) / A(n - 1 : -1 : i, i)$ 
3:   if  $i < n$  then
4:      $A(n : -1 : i + 1, i + 1 : n) = A(n : -1 : i + 1, i + 1 : n) - A(n : -1 : i + 1, i) \cdot A(n - 1 : -1 : i, i + 1 : n)$ 
5:   end if
6: end for
```

En el paso i del algoritmo, las columnas de la 1 a la i , al igual que las filas de $i + 1$ a la n de U ya están computadas. El siguiente paso es computar la fila i de U .

El algoritmo BLAS de nivel 3 reorganiza las operaciones retrasando el paso 4 del algoritmo de Neville de nivel 2 durante b pasos. Este número b es un entero pequeño que se llama *block size*. El valor de éste parámetro varía dependiendo de si queremos maximizar la velocidad del algoritmo, sin embargo, suele ser $b = 32$ ó 64 . Más adelante, se aplican todos los pasos número 4 en una misma multiplicación de matriz por matriz.

Supongamos que ya hemos computado las $i - 1$ primeras filas de U , para una matriz A

$$\begin{aligned}
A = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} &\xrightarrow{\text{paso i}} \begin{matrix} i-1 \\ b \\ n-b-i+1 \end{matrix} \begin{pmatrix} i-b & b & n-b-i+1 \\ A_{11}^* & A_{12}^* & A_{13}^* \\ A_{31}^* & A_{22}/A_{12} & A_{23} - A_{22}/A_{12} \cdot A_{13} \\ A_{31}^* & A_{32}/A_{22} & A_{33} - A_{32}/A_{22} \cdot A_{23} \end{pmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & I & 0 \\ L_{31} & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{21} & U_{31} \\ 0 & \tilde{A}_{22} & \tilde{A}_{23} \\ 0 & \tilde{A}_{31} & \tilde{A}_{33} \end{bmatrix} \tag{1}
\end{aligned}$$

donde,

$$\begin{aligned}
\bullet A_{11}^* &= L_{11} \cdot U_{11} & \bullet \tilde{A}_{22} &= A_{22}/A_{12} \\
\bullet A_{12}^* &= L_{11} \cdot U_{21} & \bullet \tilde{A}_{32} &= A_{32}/A_{22} \\
\bullet A_{13}^* &= L_{11} \cdot U_{31} & \bullet \tilde{A}_{23} &= A_{23} - A_{22}/A_{12} \cdot A_{13} \\
\bullet A_{21}^* &= L_{21} \cdot U_{11} & \bullet \tilde{A}_{33} &= A_{33} - A_{32}/A_{22} \cdot A_{23} \\
\bullet A_{31}^* &= L_{31} \cdot U_{11} & &
\end{aligned}$$

Ahora, aplicamos el algoritmo de eliminación de Neville de nivel 2 a la submatriz $\begin{pmatrix} \tilde{A}_{22} \\ \tilde{A}_{32} \end{pmatrix}$,

$$\begin{bmatrix} \tilde{A}_{22} \\ \tilde{A}_{32} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{22} \\ L_{32} \end{bmatrix} \cdot U_{22} = \begin{bmatrix} L_{22}U_{22} \\ L_{32}U_{22} \end{bmatrix} \tag{2}$$

que nos permite reescribir la submatriz de la siguiente forma,

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \tilde{A}_{22} & \tilde{A}_{23} \\ \tilde{A}_{32} & \tilde{A}_{33} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} L_{22}U_{22} & \tilde{A}_{23} \\ L_{32}U_{22} & \tilde{A}_{33} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} L_{22} & 0 \\ L_{32} & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{22} & L_{22}^{-1}\tilde{A}_{23} \\ 0 & \tilde{A}_{33} - L_{32} \cdot (L_{22}^{-1}\tilde{A}_{23}) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} L_{22} & 0 \\ L_{32} & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{22} & U_{23} \\ 0 & \tilde{A}_{33} - L_{32} \cdot U_{23} \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} L_{22} & 0 \\ L_{32} & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{22} & U_{23} \\ 0 & \tilde{\tilde{A}}_{33} \end{bmatrix} \tag{3}
\end{aligned}$$

En conjunto, conseguimos una factorización LU tal que,

$$\begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & I \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{11} & U_{21} & U_{31} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & \tilde{A}_{33} \end{bmatrix} \quad (4)$$

Esto define un algoritmo de la siguiente forma,

- Usar el algoritmo de nivel 2 de Neville para factorizar,

$$\begin{pmatrix} \tilde{A}_{22} \\ \tilde{A}_{32} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{22} \\ L_{32} \end{pmatrix} \cdot U_{22}$$

- Asignar $U_{23} = L_{22}^{-1} \tilde{A}_{23}$. Esto implica resolver un sistema triangular lineal utilizando una operación simple BLAS.
- Asignar $\tilde{\tilde{A}}_{33} = \tilde{A}_{33} - L_{32} \cdot U_{23}$, una multiplicación matriz por matriz.

Formalmente,

- 1: **for** $i = 1 : b : n - 1$ **do**
- 2: Factorizar $A(i : n, i : i + b - 1) = \begin{pmatrix} L_{22} \\ L_{32} \end{pmatrix} U_{22}$
- 3:
$$\begin{aligned} A(n : -1 : i + b + 1, i + b : n) = \\ A(n - 1 : -1 : i, i)^{-1} \cdot A(n : -1 : i + b + 1, i + b : n) \end{aligned} \quad (5)$$
- 4:
$$\begin{aligned} A(n : -1 : i + b + 1, i + b : n) = \\ A(n : -1 : i + b + 1, i + b : n) - \\ A(i + b : n, i + b) \cdot A(n - 1 : -1 : i + b, i + b : n) \end{aligned} \quad (6)$$
- 5: **end for**

Como hemos comentado antes, se necesita asignar un valor al parámetro b con el fin de maximizar la velocidad del algoritmo. Por un lado, se prefiere un b grande porque se puede ver que la velocidad aumenta cuando se multiplican matrices de gran tamaño. Por otro lado, se puede verificar que el número de operaciones de coma flotante realizadas en la línea 1 de nuestro algoritmo es de $n^2b/2$ por lo que no interesa que b sea un número grande. Éste valor suele tomarse según la máquina en la que se realicen los cálculos y suele ser $b = 32$ ó $b = 64$.