Máster en Modelización
e Investigación Matemática,
Estadística y Computación

May 19, 2015

Ejercicios Programación Cientfica

Programación Científica y Álgebra Computacional

Universidad Zaragoza 1542

Universidad de Oviedo

Autor:
Pilar Barbero Iriarte

Profesor:
Pedro Alonso Velázquez

Contents

1 Programación Científica

Reorganizar el proceso de eliminiación 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: $\quad A(n:-1:i+1,i) = A(n:-1:i+1,i)/A(n-1:-1:i,i)$
3: $\quad$ **if** $i < n$ **then**
4: $\qquad A(n:-1:i+1,i+1:n) = A(n:-1:i+1,i+1:n) - A(n:-1:i+1,i)\cdot A(n-1:-1:i,i+1:n)$
5: $\quad$ **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,

$$A = \begin{array}{l} \\ i-1 \\ b \\ n-b-i+1 \end{array} \left(\begin{array}{ccc} i-b & b & n-b-i+1 \\ A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{31} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{array} \right) = \begin{bmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & I & 0 \\ L_{31} & 0 & I \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{11} & U_{21} & U_{31} \\ 0 & \widetilde{A}_{22} & \widetilde{A}_{23} \\ 0 & \widetilde{A}_{31} & \widetilde{A}_{33} \end{bmatrix} \tag{1}$$

Ahora, aplicamos el algoritmo de eliminación de Neville de nivel 2 a la submatriz $\left(\begin{smallmatrix} \widetilde{A}_{22} \\ \widetilde{A}_{32} \end{smallmatrix}\right)$,

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

que nos permite reescribir la submatriz de la siguiente forma,

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

En conjunto, conseguimos una factorización LU tal que,

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

Esto defínde un algoritmo con los siguientes tres pasos,

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

$$\begin{pmatrix} \widetilde{A}_{22} \\ \widetilde{A}_{32} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{22} \\ L32 \end{pmatrix} \cdot U_{22}$$

- Asignar $U_{23} = L_{22}^{-1}\widetilde{A}_{23}$. Esto implica resolver un sistema triangular lineal utilizando una operación simple BLAS.

- Asignar $\widetilde{\widetilde{A}}_{33} = \widetilde{A}_{33} - L_{32} \cdot U_{23}$, una multiplicación matriz por matriz.

Formalmente,

for $i = 1 : b : n - 1$ **do**
  Factorizar $A(i : n, i : i + b - 1) = \binom{L_{22}}{L_{32}} U_{22}$
  $A(i : i + b - 1, i + b : n) = L_{22}^{-1} \cdot A(i : i + b - 1, i + b : n)$ /* Aquí se asigna U_{23} */

4: $A(i+b:n, i+b:n) = A(i+b:n, i+b:n) - A(i+b:n, i:i+b-1) \cdot A(i:i+b-1, i+b:n)$ /* Aquí se asigna $\widetilde{\widetilde{A}}_{33}$ */
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 $b = 64$.