

Obliczenia Naukowe

Laboratorium Lista Nr 5
Piotr Popis
245162

6 grudzień 2019

1 Wstęp

1.1 Streszczenie

Problemem jest rozwiązanie równania liniowego $Ax = b$, gdzie $A \in R^{n \times n}$ jest podaną macierzą, a $b \in R^n$ zadany wektorem prawych stron (przy założeniu, iż $n \geq 4$). Dodatkowo macierz A jest macierzą rzadką - taką, która ma dużo elementów zerowych oraz blokową.

$$A = \begin{bmatrix} A_1 & C_1 & 0 & \dots & 0 \\ B_2 & A_2 & C_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & B_{v-1} & A_{v-1} & C_{v-1} \\ 0 & \dots & 0 & B_v & A_v \end{bmatrix}$$

, gdzie $v = \frac{n}{l}$ przy założeniu iż l zawsze dzieli n (n jest podzielne przez l) oraz $l \geq 2$. l jest rozmiarem wszystkich kwadratowych macierzy wewnętrznych - bloków: A_k, B_k, C_k . Mianowicie:

$$A_k \in R^{l \times l}, k = 1, \dots, v,$$

A jest macierzą gęstą,

0 jest kwadratową macierzą zerową stopnia l ,

Natomiast macierz

$$B_k \in R^{l \times l}, k = 2, \dots, v,$$

B_k ma tylko dwie ostatnie kolumny niezerowe i jest postaci:

$$B_k = \begin{bmatrix} 0 & \dots & 0 & b_{1l-1}^k & b_{1l}^k \\ 0 & \dots & 0 & b_{2l-1}^k & b_{2l}^k \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & b_{ll-1}^k & b_{ll}^k \end{bmatrix}$$

Ostani z bloków

$$C_k \in R^{l \times l}, k = 1, \dots, v-1,$$

C_k jest macierzą diagonalną i jest postaci:

$$C_k = \begin{bmatrix} c_1^k & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c_2^k & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & c_{l-1}^k & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & c_l^k \end{bmatrix}$$

Z treści n jest ogromne co wiąże się dużym obciążeniem pamięciowym jak i czasowym w przypadku zwykłej tablicy. Należy skorzystać z pakietu SparseArrays, która zawiera specjalną strukturę efektywnie pamiętającą specyficznie macierze, tj rzadkość lub regularność występowania elementów zerowych i niezerowych. Istniejące algorytmy do rozwiązywania takich problemów trzeba po prostu zmodyfikować do użycia tej specjalnej struktury. Jeśli l jest stałe Algorytmy da się zoptymalizować czasowo z $\mathcal{O}(n^3)$ do $\mathcal{O}(n)$.

1.2 Treść

Zadanie 1 Należy stworzyć funkcję rozwiązującą układ $Ax = b$ metodą eliminacji Gaussa uwzględniającą postać macierzy A zadanej w streszczeniu dla dwóch wariantów

- (a) bez wyboru elementu głównego
- (b) z częściowym wyborem elementu głównego

Zadanie 2 Należy napisać funkcję wyznaczającą rozkład LU macierzy A metodą eliminacji Gauss'a uwzględniającą specyficzną postać macierzy A dla

- (a) bez wyboru elementu głównego
- (b) z częściowym wyborem elementu głównego

Zadanie 3 Należy napisać funkcję rozwiązującą układ równań $Ax = b$ (uwzględniającą specyficzną postać macierzy A).

Wszystkie funkcje powinny być umieszczone w module o nazwie blocksys. Należy przeczytać Sparse Arrays manual Julia. Założyć, że dostęp do elementu macierzy jest w czasie stałym. Nie można używać $x = \frac{A}{b}$ oraz lu z modułu LinearAlgebra.

2 Zadanie 1

2.1 Opis standardowej procedury wraz z analizą złożoności algorytmu

Na czym polega metoda eliminacji Gauss'a? Metoda ta polega na sprowadzeniu układu równań(macierzy) do równoważnego układu z wykorzystaniem macierzy trójkątnej górnej, następnie rozwiązaniu tego układu przy pomocy algorytmu podstawiania wstecz.

Na czym polega algorytm podstawiania wstecz? Algorytm ten bazuje na zerowaniu kolejnych elementów macierzy poniżej diagonal(czyli tej niezerowej przekątnej).

Przebieg procedury

1. Zerowanie elementów poniżej pierwszego wiersza w pierwszej kolumnie.
2. Ogólnie, aby wyzerować a_{i1} od wiersza i -tego odejmowany jest wyraz pierwszy pomnżony przez liczbę $\frac{a_{i1}}{a_{11}}$
3. Następnie przechodzimy do kolejnej kolumny(tutaj drugiej itd) i powtarzamy powyższe procedury z taką zmianą, że teraz odejmowany wiersz i (tutaj drugi a_{22} itd).

Niestety procedura nie zadziała jeśli którktkolwiek z diagonalnych elementów będzie zerem(jak widać we wzorze). Aby rozwiązać ten problem należy przeprowadzić odpowiednią modyfikację. W i -tym kroku , w i -tej kolumnie należy wyszukać w kolejnych wierszach j -ty element o wartości co do modułu największej i zamienić wtedy a_{ii} z a_{ji} (wzór: $a_{wierszkolumna}$).

Następnie korzystamy z algorytmu wstecz, czyli matematycznie wzoru: $x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}}{a_{ii}}$.

Począwszy od ostatniego indeksu.(n)

Zakładając, że n jest rozmiarem macierzy złożoność obliczeniowa eliminacji Gaussa wynosi co najwyżej $\mathcal{O}(n^3)$, a algorytm podstawiania wstecz $\mathcal{O}(n^2)$. Łącznie, aby rozwiązać układ należy wykonać $\mathcal{O}(n^3)$ operacji.

2.2 Opis implementacji wraz z analizą złożoności algorytmu

2.2.1 SparseMatrix pamięć

Celem zadania jest modyfikacja i optymalizacja algorytmu. Zauważmy, że rozpatrywana macierz ma dość specyficzną, nietypową postać. Jest macierzą rzadką. Ma $(l+3)n - 3l$ elementów, które nie są zerami.

l^2 - w każdym z v bloków A_k ,
 $2l$ - w każdym z $v-1$ bloków B_k ,
 l - w każdym z $v-1$ bloków C_k

Do przechowywania macierzy wykorzystamy strukturę do przechowywania macierzy rzadkich SparseMatrixCSC. Macierze takie są przechowywane w skompresowanym porządku kolumnowym. Algorytm Gauss'a natomiast ma przebieg wierszowy, zatem w implementacji musimy zamienić miejscami indeksy kolumny i wiersza i pracować na macierzach transponowanych. Aby ułatwić proces zrozumienia algorytmu uznaję to za problem implementacyjny i indeksuję w roważaniach w sposób standardowy.

Dzięki użyciu takiej struktury mamy szybszy dostęp do elementów.

2.2.2 Modyfikacja, optymalizacja algorytmu

Zwróćmy uwagę na postać macierzy A . Jest to macierz diagonalna, a nawet trójdagonalna. W dodatku jest to macierz blokowa(A_k, B_k, C_k). Zauważmy, że nie jest konieczne zerowanie wszystkich elementów poniżej diagonal(przekątnej), bo już są wyzerowane.

Pozwala to zredukować ilość wykonywanych obliczeń.

Indeks rzędu ostatniego niezerowego elementu w kolumnie W pierwszych $l-2$ kolumnach potencjalne niezerowe elementy znajdują się w l -pierwszych rzędach i są to elementy bloku A_1 , dla kolejnych l kolumn elementy niezerowe znajdują się prawdopodobnie w pierwszych $2l$ rzędach są to elementy bloku A_3 oraz dwie ostatnie kolumny bloku B_2 . W kolejnych l kolumnach niezerowe elementy znajdują się w pierwszych $3l$ rzędach są nimi elementy bloku B_3 oraz elementy bloku A_4 rzecz jasna niezerowe elementy.

Zatem ostatni niezerowy element w danej kolumnie można obliczyć korzystając z funkcji $\min()$. Ostatecznie ostatni niezerowy element w kolumnie wyrażamy wzorem: $lastNotZeroInColumn = \min\left(n, l + l \left\lfloor \frac{column + 1}{l} \right\rfloor\right)$

Indeks kolumny ostatniego niezerowego elementu w rzędzie Zwróćmy teraz uwagę na wiersze. W każdym wierszu ostatnim elementem niezerowym jest element diagonalnego bloku C . Poza pierwszym wierszem, każdy z tych elementów jest oddalony równo o l od elementów całej macierzy. W ostatnich rzędach ostatnie niezerowe elementy to po prostu elementy ostatniego bloku A_v leżące pod indeksem n . Ostatecznie ostatni niezerowy element w rzędzie to:

$$lastNotZeroInRow = \min(n, row + l)$$

Znając indeksy ostatniego niezerowego elementu w rzędzie i kolumnie wiemy, do jakiego miejsca jest sens wykonywać obliczenia. Pozwala to znacznie przyspieszyć proces obliczania. Metoda eliminacji Gauss'a doprowadza nas do macierzy trójkątnej górnej, którą rozwiążemy przy pomocy algorytmu podstawiania wstecz. Mimo dotychczasowych usprawnień zauważyłem również, że wciąż algorytm można usprawnić. Algorytm eliminacji Gaussa przecież nie dostawia elementów niezerowych do danej macierzy (Poza elementami pod diagonalą bloków C). Zatem można skorzystać z wzoru na $lastNotZeroInRow$ i sumować elementy tylko do określonego indeksu.

2.2.3 Analiza złożoności obliczeniowej zmodyfikowanego algorytmu

Zakładam, że l jest stałą.

Zewnętrzna pętla i eliminacji Gauss'a wykonuje $n-1$ przejść, wewnętrzna j wykonuje dokładnie $2l$ przebiegów, a najbardziej wewnętrzna k i nie mająca w sobie żadnego innego zagnieżdżenia l operacji. Zewnętrzna pętla podstawiania wykonuje n przejść, a wewnętrzna co najwyżej l . W sumie łącznie dla eliminacji mamy $2l^2n$ operacji, a dla podstawiania nl , zatem złożoność wynosi $\mathcal{O}(n)$ nazywana złożonością liniową.

2.3 Wyniki eksperymentów porównujących zaimplementowane algorytmy dla danych testowych(tabele, wykresy) oraz interpretacja

2.4 Wnioski