

Obliczenia Naukowe

Laboratorium Lista Nr 5
Piotr Popis
245162

6 grudzień 2019

0 Wstęp

0.1 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 $\mathcal{O}(n)$.

0.2 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.

1 Zadanie 1

1.1 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.

1.2 Opis implementacji wraz z analizą złożoności algorytmu

1.2.1 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.

$$\begin{aligned} l^2 &- \text{ w każdym z } v \text{ bloków } A_k, \\ 2l &- \text{ w każdym z } v-1 \text{ bloków } B_k, \\ l &- \text{ w każdym z } v-1 \text{ bloków } C_k \end{aligned}$$

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.

1.2.2 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: $lastNotZeroInColumn(column) = \min\left(n, l + l \left\lfloor \frac{column + 1}{l} \right\rfloor\right)$

Indeks kolumny ostatniego niezerowego elementu w rzędzie Zwróćmy teraz uwagę na wiersze. W każdym wierszu ostatnim elementem niezerowym jest element diagonalu 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:

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

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, który 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.

1.2.3 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.

1.3 Algorytm z częściowym wyborem elementu głównego rozwiązanie problemu zerowego elementu diagonalu

Jak już wspomnieliśmy w paragrafie *Przebieg procedury* na początku sekcji 2.1 *Opis standardowej procedury wraz z analizą złożoności algorytmu* możemy napotkać na sytuację, w której nasz algorytm nie zadziała. Mianowicie, gdy którykolwiek z elementów diagonalu będzie zerem. Na szczęście problem ten można rozwiązać w dość prosty sposób rozwiązać. W każdej kolumnie przed rozpoczęciem zerowania wybrać maksymalny co do wartości bezwzględnej element w kolumnie i uznać go za element, od którego będziemy odejmować.

Jak wyglądają modyfikacje wynikające z częściowego wyboru elementu głównego? Zaczniemy od analizy kolumny. Samo ograniczenie ostatniego, maksymalnego niezerowego argumentu w danej kolumnie się nie zmieni, natomiast wartość podlega wątpliwości. W wyniku zamiany rzędami argumentu leżącego wyżej z leżącym niżej i kolejnym odejmowaniu go od wierszy poniższych możemy napotkać się na sytuację, w której program wypełni zerowy argument. Granicznym przypadkiem jest oczywiście zamiana i -tego wiersza z wierszem ostatnim (niezerowym), zatem wzór na ostatni niezerowy element w danej kolumnie należy zmienić, tzn:

$$lastNonZeroInRow(lastNonZeroInColumn(row)) = \min(lastNonZeroInColumn(row) + l, n) =$$

$$= \min(\min(n, l + l \lfloor \frac{row + 1}{l} \rfloor) + l, n) = \min(n, \underline{2l} + l \lfloor \frac{row + 1}{l} \rfloor)$$

Ostatecznie teraz indeks kolumny ostatniego niezerowego elementu w wierszu wyznaczamy wzorem :

$$\min(n, \underline{2l} + l \lfloor \frac{row + 1}{l} \rfloor)$$

można je uznać za górne ograniczenie, czyli max indeks kolumny w row-wym wierszy *po przepermutowaniu*. W celu uniknięcia nadużycia zasobów pamięci wykorzystam addytywną tablicę permutacji, zawierającą indeksy kolejnych wierszy macierz. Zamiana zatem wykonywana jest na kopii, polega na odwołaniu się do tablicy permutacji np pod indeksem row będzie leżał row-ty wiersz z macierzy.

1.4 Analiza złożoności obliczeniowej zmodyfikowanego algorytmu z częściowym wyborem elementu głównego

Wariant ten jest nieco bardziej kosztowny. Pojawia się koszt wyszukania maksymalnego elementu głównego o największej co do wartości bezwzględnej wartości w danej "zerowanej", bieżącej kolumnie. Wyszukanie go występuje w *lastNotZeroInColumn* – i elementów, w przybliżeniu uznaję za $2l$. Wewnętrzna pętla przechodzi po $3l$ elementów każdego z wierszy. Ostatecznie koszt to $n2l(2l + 3l) = 10l^2n$, zatem jest około 5 razy bardziej złożony obliczeniowo niż algorytm bez wyboru elementu głównego. Mimo to algorytm jest wciąż asymptotycznie liniowy $\mathcal{O}(n)$

2 Zadanie 2

2.1 Opis standardowej procedury wraz z analizą złożoności algorytmu

Na czym polega rozkład LU Rozkład LU polega na takim rozłożeniu macierzy A na czynniki L oraz U , gdzie obydwie macierze są macierzami trójkątnymi z tym, że U jest macierzą trójkątną górną, a L jest macierzą trójkątną dolną. Inaczej mówiąc rozkład LU polega na przedstawieniu macierzy A w postaci iloczynu

$$A = LU$$

z zadanymi warunkami. Dodatkowo zakładamy, że wszystkie elementy diagonalne macierzy L są równe 1.

2.2 Opis implementacji wraz z analizą złożoności algorytmu

Algorytm wyznaczania rozkładu LU przebiega sposób identyczny jak algorytm eliminacji Gauss'a z punktu 1.2 z jedną modyfikacją. Mianowicie w miejscach, w których wcześniej zapisywaliśmy zera poniżej otrzymanej macierzy górnej trójkątnej teraz będziemy zapisywać ilorazy $z = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}$. Następnie wykorzystamy je jako elementy macierzy L , a pozostałe zostaną elementami macierzy U . Oczywiście w przypadku samego rozkładu nie używamy algorytmu wstecz, ale nie wpływa to na złożoność, która wciąż jest liniowa. Złożoność w takim wypadku jest taka sama jak dla zmodyfikowanego algorytmu eliminacji Gauss'a, czyli $\mathcal{O}(n)$.

2.3 Algorytm z częściowym wyborem elementu głównego

Algorytm wyznaczania rozkładu LU przebiega sposób identyczny jak algorytm eliminacji Gauss'a z punktu 1.3 z wyborem częściowym elementu głównego także z modyfikacją, iż w miejsce zerowanych elementów wstawiamy

ilorazy $z = \frac{a_{ij}}{a_{jj}}$ oraz faktem, iż metoda ta zwróci wektor permutacji p potrzebny do przywrócenia początkowego porządku wierszy w macierzy. Nie używamy algorytmu wstecz do wyznaczenia rozkładu, ale nie zmienia to naszej złożoności. Złożoność w tym przypadku tak jak w powyższym jest analogiczna i liniowa, czyli wynosi $\mathcal{O}(n)$.

3 Zadanie 3

3.1 Rozwiązywanie układu równań przy użyciu rozkładu LU

Rozkład LU możemy otrzymać w wyniku przeprowadzenia eliminacji Gauss'a. Czynniki U uzyskujemy w wyniku przekształcenia macierzy A w skutek użycia wyżej wymienionego algorytmu. Natomiast macierz L możemy stworzyć wykorzystując czynniki z użycie do zerowania macierzy. Wtedy zapisujemy mnożnik użyty w i -tym wierszu, w j -tej kolumnie w odpowiadającej jej komórce macierzy L . Do przeprowadzenia rozkładu musimy wykonać $\mathcal{O}(n^3)$ działań. Wykorzystanie rozkładu LU jest jednak zdecydowanie skuteczniejsze jeśli zamierzamy użyć tej samej macierzy przy wielu układach, wtedy algorytm eliminacji Gauss'a wykonany jest raz. A następnie układ dzielimy na dwa etapy:

$$\begin{cases} Lz = b \\ Ux = z \end{cases}$$

Koszt zostaje zredukowany do $\mathcal{O}(n^2)$. Tak więc rozwiązanie układu równań w sytuacji, kiedy mamy rozkład LU to rozwiązanie dwóch równań z macierzą trójkątną dolną oraz górną.

Jak to osiągnąć? Należy wykorzystać w odpowiedni sposób znane już nam algorytmy podstawiania w przód i wstecz poznane już na pierwszej liście. Struktura naszych macierzy w obu przypadkach pozwala zredukować ilość wykonywanych operacji.

Jak teraz będą wyglądać nasze ograniczenia? Dla algorytmu podstawiania wstecz ograniczenie już wyznaczaliśmy. Indeks ostatniej niezerowej kolumny w danym wierszu bez wyboru elementu głównego wyraża się wzorem $lastNotZeroInRow(row) = \min(n, row + l)$, natomiast z wyborem częściowym elementu głównego wzoru $lastNotZeroInRow(row) = \min\left(n, \underline{2}l + l \left\lfloor \frac{row + 1}{l} \right\rfloor\right)$. Pojawia się więc konieczność wyznaczenia wzoru dla algorytmu podstawiania w przód. Pierwszy niezerowy indeks kolumny to $firstNotZeroInRow = \min\left(n, l \left\lfloor \frac{row - 1}{l} \right\rfloor\right)$.

3.2 Analiza złożoności

W każdym kolejnym wierszu wykonywane jest wykonane $\mathcal{O}(l)$ operacji. Wierszy jest n . Ostatecznie, gdy dany jest rozkład LU macierzy rozwiązanie układu równań wymaga wykonania nl , zatem $\mathcal{O}(n)$ operacji.

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

Do sprawdzenia poprawności zaimplementowanych metod utworzono funkcję computeRSV, która generuje takie wektory prawych stron, aby rozwiązaniem układu był wektor $(1, \dots, 1)^T$. Następnie przy użyciu zaimplementowanych funkcji rozwiązano układy $Ax = b$. Policzono czasy oraz błędy względne umieszczone wyniki poniżej.

4.1 Porównanie błędów względnych

n	Gauss	GaussWithPivot	LU	LUWithPivot
16	5.45310538513047e-16	1.5023947200459153e-15	4.574031282344652e-15	5.064917260848194e-16
1000	2.933079611128323e-14	1.0677494543754276e-15	2.9268827938365774e-14	9.009512859023695e-16
5000	1.6706355850088109e-13	1.8192223023676713e-15	3.234648622831034e-13	9.052246850857828e-16
10000	3.6738202190459565e-14	7.359706866734175e-16	3.6304377614821076e-14	4.46959574538234e-16
25000	8.714734067251055e-14	1.3797382568317616e-15	8.666083060971685e-14	9.326906914352039e-16

4.2 Porównanie złożoności czasowych

n	Gauss	GaussWithPivot	LU	LUWithPivot
16	5.45310538513047e-16	1.5023947200459153e-15	4.574031282344652e-15	5.064917260848194e-16
1000	2.933079611128323e-14	1.0677494543754276e-15	2.9268827938365774e-14	9.009512859023695e-16
5000	1.6706355850088109e-13	1.8192223023676713e-15	3.234648622831034e-13	9.052246850857828e-16
10000	3.6738202190459565e-14	7.359706866734175e-16	3.6304377614821076e-14	4.46959574538234e-16
25000	8.714734067251055e-14	1.3797382568317616e-15	8.666083060971685e-14	9.326906914352039e-16

5 Wnioski