

# Obliczenia naukowe

## Lista 5

Aleksandra Wójcik

Styczeń 2023

### 1 Opis zadania

#### 1.1 Ogólne przedstawienie problemu

Zadanie na liście piątej nawiązuje do rozwiązywania układów równań typu  $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ , dla danej macierzy  $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  i wektora lewych stron  $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ . Macierz  $\mathbf{A}$  jest macierza rzadka i blokowa o następującej strukturze:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \mathbf{A}_1 & \mathbf{C}_1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{B}_2 & \mathbf{A}_2 & \mathbf{C}_2 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{B}_3 & \mathbf{A}_3 & \mathbf{C}_3 & \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{v-2} & \mathbf{A}_{v-2} & \mathbf{C}_{v-2} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_{v-1} & \mathbf{A}_{v-1} & \mathbf{C}_{v-1} \\ \mathbf{0} & \cdots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{B}_v & \mathbf{A}_v \end{pmatrix}.$$

Blok  $\mathbf{A}_k$  jest macierza gęsta, blok  $\mathbf{B}_k$  posiada wartości niezerowe jedynie w ostatniej kolumnie, a  $\mathbf{C}_k$  jest macierza diagonalna. Celem zadania jest efektywnie rozwiązanie układu równań  $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$ , pod względem czasowym, ale także pamięciowym.

### 2 Sposób pamietania macierzy $\mathbf{A}$

W celu przechowywania w pamięci dużych macierzy rzadkich wykorzystuje się używam typu *SparseMatrixCSC*, który jest wbudowany w standardową bibliotekę Julii *SparseArray*. *SparseMatrixCSC* jest efektywne pod względem pamięci, ponieważ przechowuje tylko niezerowe elementy oraz informacje o ich pozycjach. W przypadku dużych macierzy rzadkich, takie podejście znacznie redukuje zużycie pamięci w porównaniu do tradycyjnych, pełnych macierzy.

### 3 Dostosowywanie algorytmów do macierzy blokowych, rzadkich

W celu dostosowania algorytmów do tak specyficznej macierzy, należy zastosować szereg jej własności. Przede wszystkim bardzo pomocna obserwacja okazuje się zauważenie na jakich miejscach macierzy znajdują się niezerowe elementy. Wiemy, że  $A \in R^{n \times n}$ , natomiast bloki  $A_k, B_k, C_k \in R^{l \times l}$ . Z tymi wiadomościami jesteśmy w stanie łatwo obliczyć indeksy elementów z niezerowymi wartościami. Weźmy przykładową macierz:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

#### 1. Wiersze

##### (a) Obliczanie pierwszego niezerowego indeksu

Zerkając na powyżej przedstawioną przykładową macierz spełniającą wymogi zadania, możemy dostrzec powtarzający się wzorec. Jak możemy dostrzec w wierszach macierzy za przekątną pojawiają się na zmianę 1 lub 2 niezerowe wartości w sposób cykliczny. W obrębie wysokości jednego bloku, zawsze wiersz o niższym indeksie zawiera mniejszą liczbę wartości niezerowych. Toteż można dojść do konkluzji, że skoro macierz  $B_k$  posiada niezerowe wartości jedynie w swojej ostatniej kolumnie, to dla wierszy w obrębie wysokości tego bloku, każdy kolejny wiersz będzie miał więcej wartości niezerowych przed przekątną niż poprzedni, a liczba tych elementów będzie należała do zbioru  $1, \dots, k$ . A więc łatwo można obliczyć, że

$$\text{first row index} = k - (l - (k \bmod l))$$

Oczywiście należy jeszcze pamiętać, że dla pierwszych wierszy nie ma bloku  $B$ , a więc należy obliczyć

$$\max(1, \text{first row index})$$

##### (b) Obliczanie ostatniego niezerowego indeksu

Obliczenie ostatniego ostatniego indeksu jest zupełnie trywialne, ponieważ łatwo zauważyć, że dla każdego wiersza, liczba elementów występujących za przekątną zawsze wynosi 1. Wiec

$$\text{last row index} = k + l$$

Oczywiście należy uwzględnić, że  $l$  ostatnich wierszy nie posiada bloku C, więc należy obliczyć  $\max(n, k + l)$ .

## 2. Kolumny

### (a) Obliczanie pierwszego niezerowego indeksu

Obliczenie pierwszego indeksu zawierającego niezerową wartość ogranicza się do zauważenia, że nad przekatną zawsze znajduje się  $l$  niezerowych elementów. Z tego wynika, że

$$\text{first column index} = k - l$$

Natomiast trzeba wziąć pod uwagę fakt, że pierwsze  $l$  kolumn nie zawiera bloku C, więc tak naprawdę trzeba obliczyć  $\max(1, \text{first col index})$ .

### (b) Obliczanie ostatniego niezerowego indeksu

Łatwo można zauważyć, że liczba niezerowych elementów pojawiających się pod przekatną zmienia się cyklicznie. To zachowanie jest bardzo podobne do zachowania opisanego w podpunkcie opisującym wyznaczanie pierwszego indeksu zawierającego element niezerowy w wierszu. A więc łatwo można zauważyć, że

$$\text{last column index} = k + l - (k \bmod l)$$

Natomiast trzeba wziąć pod uwagę fakt, że w  $l$  ostatnich kolumnach nie występuje dolny blok B, a więc należy obliczyć  $\min(n, k + l - (k \bmod l))$

Używając powyżej wyznaczonych indeksów, jestem w stanie operować jedynie na elementach niezerowych bez konieczności przeglądania macierzy. Zastosowanie tej wiedzy znacząco przyspiesza działanie algorytmów.

## 4 Zadanie 1

### 4.1 Opis zadania

Należy napisać funkcję rozwiązującą układ  $\mathbf{Ax}=\mathbf{b}$  metodą eliminacji Gaussa dla dwóch wariantów:

- bez wyboru elementu głównego
- z częściowym wyborem elementu głównego

### 4.2 Opis metody Gaussa bez wyboru elementu głównego

Eliminacja Gaussa to popularna metoda rozwiązywania układów równań. Rozwiązując układ  $m$  równań liniowych z  $n$  niewiadomymi, należy za pomocą operacji elementarnych wyłącznie na wierszach sprowadzić macierz układu równań liniowych do postaci schodkowej, by następnie wyznaczyć finalne rozwiązanie.

---

**Algorithm 1:** Metoda Eliminacji Gaussa

---

**Input:** Macierz współczynników  $A$ , Wektor prawych stron  $b$

**Output:** Rozwiązanie układu równań  $Ax = b$

```
1 for  $k \leftarrow 1$  to  $n - 1$  do
2   for  $i \leftarrow k + 1$  to  $\min(n, k + l - k\%l)$  do
3      $m \leftarrow \frac{A[i,k]}{A[k,k]}$ ;
4      $A[i,k] \leftarrow 0$ ;
5     for  $j \leftarrow k$  to  $n$  do
6        $A[i,j] \leftarrow A[i,j] - m \cdot A[k,j]$ ;
7      $b[i] \leftarrow b[i] - m \cdot b[k]$ ;
8 for  $i \leftarrow n$  to  $1$  do
9    $x[i] \leftarrow \frac{b[i]}{A[i,i]}$ ;
10  for  $j \leftarrow i + 1$  to  $n$  do
11     $x[i] \leftarrow x[i] - \frac{A[i,j]}{A[i,i]} \cdot x[j]$ ;
12 return  $x$ ;
```

---

### 4.3 Opis metody Gaussa z częściowym wyborem elementu głównego

W powyższej metodzie nie wybierano elementu głównego, natomiast teraz zastosuje pewnego rodzaju modyfikację. Metoda eliminacji Gaussa z częściowym wyborem ma na celu zminimalizowanie błędów numerycznych związanych z dzieleniem przez małe liczby. W tej metodzie, przed dokonaniem eliminacji w danym kroku, wybierany jest element główny jako największy (w wartości bezwzględnej) element w danej kolumnie, a następnie zamieniane są ze sobą odpowiednie wiersze. Reszta algorytmu wykonywana jest bez zmian. Do łatwiejszego zobrazowania problemu w pseudokodzie używam `spaw`, natomiast w algorytmie będę pracować na permutacjach na wektorze  $b$ , co ułatwi mi późniejsze odczytanie wyników.

### 4.4 Wyniki

Wyniki dla zwyczajnej metody eliminacji gaussa:

---

**Algorithm 2:** Metoda Eliminacji Gaussa

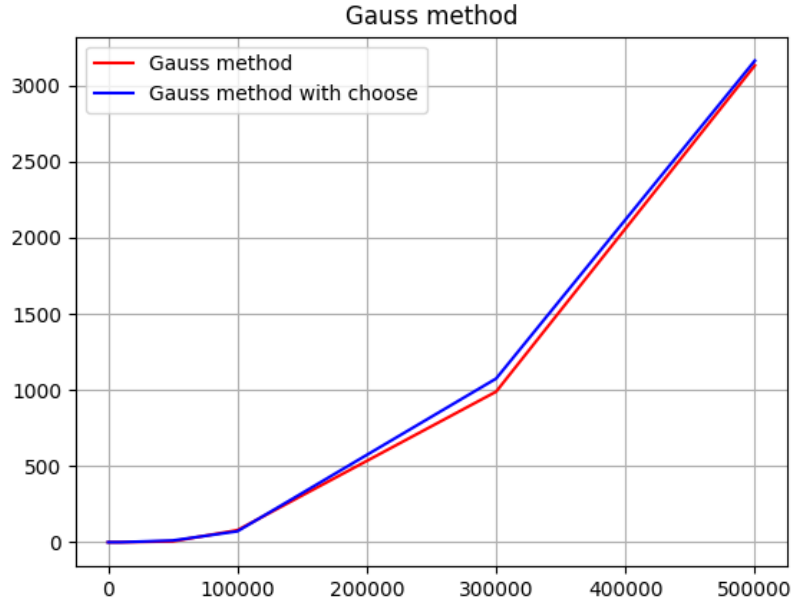
---

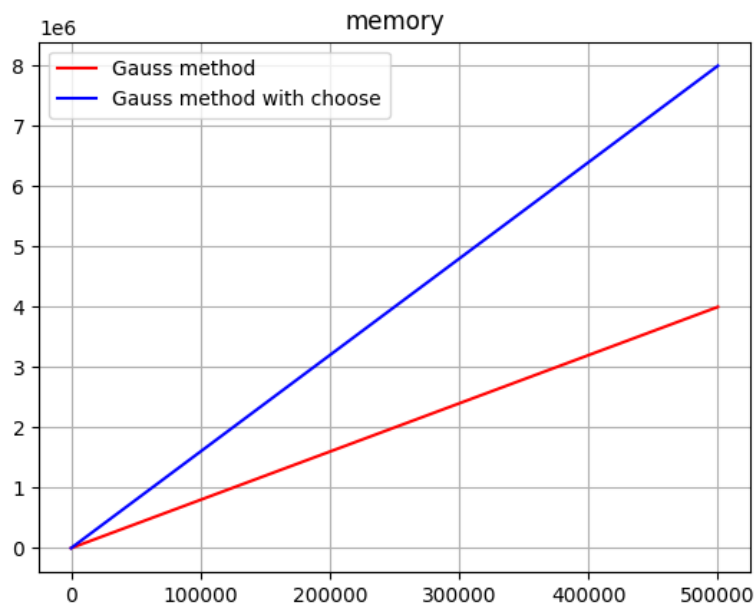
**Input:** Macierz współczynników  $A$ , Wektor prawych stron  $b$

**Output:** Rozwiązanie układu równań  $Ax = b$

```
1 for  $k \leftarrow 1$  to  $n - 1$  do
2   swap(max, k);
3   for  $i \leftarrow k + 1$  to  $\min(n, k + l - k\%l)$  do
4      $m \leftarrow \frac{A[i,k]}{A[k,k]}$ ;
5      $A[i,k] \leftarrow 0$ ;
6     for  $j \leftarrow k$  to  $n$  do
7        $A[i,j] \leftarrow A[i,j] - m \cdot A[k,j]$ ;
8      $b[i] \leftarrow b[i] - m \cdot b[k]$ ;
9 for  $i \leftarrow n$  1 do
10   $x[i] \leftarrow \frac{b[i]}{A[i,i]}$ ;
11  for  $j \leftarrow i + 1$  to  $n$  do
12     $x[i] \leftarrow x[i] - \frac{A[i,j]}{A[i,i]} \cdot x[j]$ ;
13 return  $x$ ;
```

---





## 4.5 Obserwacje

Z powyżej przedstawionych wykresów można zaobserwować, że zużycie pamięci jest bardzo podobne. Natomiast złożoność czasowa dla algorytmu eliminacji Gaussa z częściowym wyborem jest zauważalnie wyższa.

## 4.6 Wnioski

Powodem takiego stanu rzeczy jest wykonywanie dodatkowych operacji, mających na celu wstawienie w dane miejsce macierzy weirsza z największa wartością elementu w danej kolumnie.

## 5 Zadanie 2

Zadanie 2 polega na implementacji rozkładu LU otrzymanej macierzy rzadkiej  $A$ , dla dwóch wariantów:

- bez wyboru elementu głównego
- z czesciowym wyborem elementu głównego

## 5.1 Opis rozkładu macierzy LU

Rozkład LU to dekompozycja macierzy  $A$  na iloczyn dwóch macierzy  $L$  i  $U$ , gdzie  $L$  to macierz trójkatna dolna o jedynkach na przekątnej.  $U$  to macierz trójkatna górna. Dzięki zaimplementowaniu metody eliminacji Gaussa mam już podstawę do wyznaczenia rozkładu LU, ponieważ powsatła w ten sposób macierz odpowiada macierzy  $U$ . Zawiera ona niezerowe elementy jedynie na przekątnej i powyżej jej. Z tego wynika, pozostaje wyznaczenie macierzy  $L$ .

Macierz dolno trójkatna posiada 1 na przekątnej, z tego powodu konstrukcję  $L$  rozpoczniemy od stworzenia macierzy jednostkowej o zadanych wymiarach. Następnie  $L$  również będzie konstruowana podczas przebiegu algorytmu eliminacji gaussa, zapisując współczynniki użyte do eliminacji w odpowiednich miejscach macierzy.

Jednakże, w celu efektywnego pamiętania macierzy  $L$  i  $U$ , wystarczy jedna macierz, badżac połączeniem tych dwóch.

Pseudokod:

---

**Algorithm 3:** Rozkład LU

---

**Input:** Macierz współczynników  $A$ , macierz jednostkowa  $L$

**Output:** Dekompozycja LU

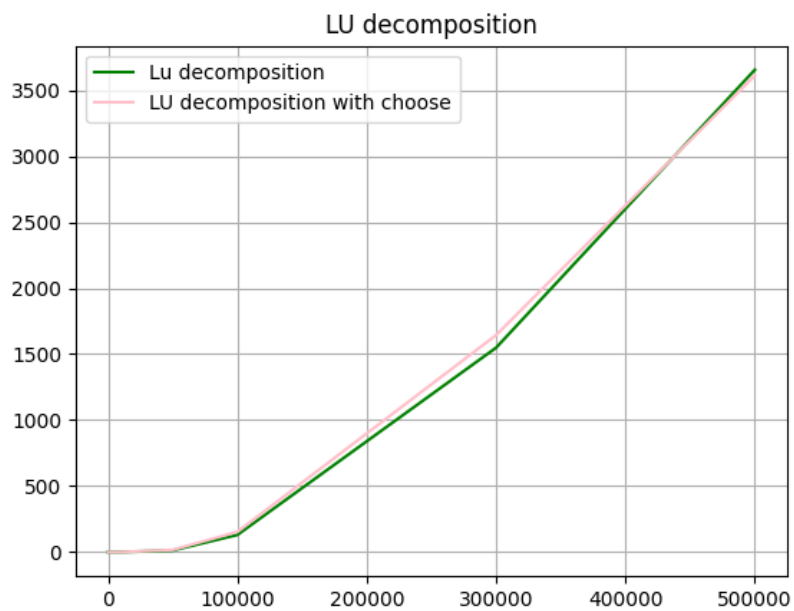
```
1 for  $k \leftarrow 1$  to  $n - 1$  do
2   for  $i \leftarrow k + 1$  to  $\min(n, k + l - k\%l)$  do
3      $m \leftarrow \frac{A[i,k]}{A[k,k]}$ ;
4      $A[i, k] = 0$ ;
5      $L[i, k] = m$ ;
6     for  $j \leftarrow k$  to  $n$  do
7        $A[i, j] \leftarrow A[i, j] - m \cdot A[k, j]$ ;
8 return  $x$ ;
```

---

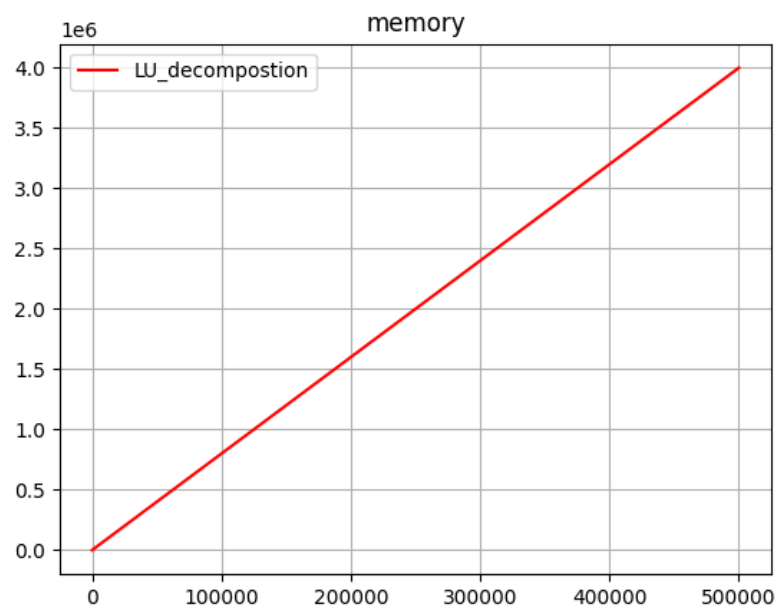
Pseudokod dla rozkładu LU z czesciowym wyborem zawiera dodatkowo wybór i zamiane wiersza, który ma aktualnie najwyższa wartość w kolumnie.

## 5.2 Wyniki

Wyniki dla dekompozycji LU bez wyboru elementu głównego:



Wyniki dla dekompozycji LU z częściowym wyborem elementu głównego:





### 5.3 Obserwacje

Z powyżej przedstawionych wykresów można zaobserwować, że zurzycie pamięci jest bardzo podobne.

### 5.4 Wnioski

Wyższa złożoność czasowa dla przypadku z częściowym wyborem wynika z wykonywania dodatkowych operacji polegających na wybraniu największego elementu z danej kolumny, bedazego pod rozważanym wierszem, a następnie namianie wierszy, w przypadku znalezienia większego elementu.

## 6 Wnioski ogólne

Rozwiązanie dla owawianych metodm zawsze mają lepszą złożoność czasowa dla przypadków bez wyboru elementu głównego. Mim tego, że ustalanie elementu głównego powoduje zwiększenie się czasu oczekiwania na wynik, to trzeba zauważyć, że wybór elementu głównego pozytywnie wpływa na jakość otrzymywanych wyników, ponieważ eliminuje błędy numeryczne, wynikające z dzielenia liczb przez niewielkie wartości.