Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα **5** : Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΠΑΤΡΩΝ
UNIVERSITY OF PATRAS
ΑΝΟΙΚΤΑ ακαδημαϊκά μαθήματα ΠΠ
Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Πατρών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σκοπός Ενότητας

- Επίλυση γραμμικών συστημάτων και εκμετάλλευση ιδιοτήτων του μητρώου
- Παραγοντοποίηση LU με μερική οδήγηση
- Επαναληπτική εκλέπτυνση
- Συμμετρικά θετικά ορισμένα μητρώα
- Παραγοντοποίηση Cholesky και μέθοδος Συζυγών Κλίσεων (CG)

Περιεχόμενα

Θεμελιώδη προβλήματα της ΥΓΑ

Βασικές πράξεις γραμμικής άλγεβρας Δίδονται $A \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_3}$, $B \in \mathbb{R}^{n_3 \times n_2}$, $C \in \mathbb{R}^{n_1 \times n_2}$, να υπολογιστεί $C + AB$.

Επίλυση γραμμικού συστημάτος Δίδονται $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ και $b \in \mathbb{R}^n$. Να υπολογιστεί $x \in \mathbb{R}^n$ τ.ώ. $Ax = b$.

Γραμμικά ελάχιστα τετράγωνα Δίδονται $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ανδ $b \in \mathbb{R}^m$. Να υπολογιστεί $x \in \mathbb{R}^n$ που επιλύει $\arg\min_x \|b - Ax\|_2$.

Πρόβλημα ιδιοτιμών Δίδεται $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Να υπολογιστούν τα ιδιοζεύγη $\lambda \in \mathbb{C}$ και $x \in \mathbb{C}^n$: $Ax = \lambda x$.

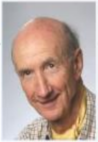
Γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών Δίδονται $A, B \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Να υπολογιστούν $\lambda \in \mathbb{C}$ και $x \in \mathbb{C}^n$: $Ax = \lambda Bx$.

Διάσπαση ιδιαζουσών τιμών Δίδεται $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Να υπολογιστεί διαγώνιο $\Sigma \in \mathbb{R}^{m \times n}$, ορθογώνια $U \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n \times n}$: $A = U \Sigma V^\top$.

Συναρτήσεις μητρώων Δίδονται $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ και συνάρτηση f. Να υπολογιστεί το $f(A)$ ή το $f(A)B$ για $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$ ή το $Cf(A)B$ για $C \in \mathbb{R}^{k \times n}$.

SIAM REVIEW
Vol. 52, No. 4, pp. 771–791

Book Reviews



Review by B. Parlett, UB Berkeley

Featured Review

The Matrix Eigenvalue Problem: GR and Krylov Subspace Methods. *By David S. Watkins.* SIAM, Philadelphia, 2007. $99.00. x+442 pp., softcover. ISBN 978-0-898716-41-2.

Numerical Methods for General and Structured Eigenvalue Problems. *By Daniel Kressner.* Springer, Berlin, 2005. $99.00. xiv+258 pp., softcover. ISBN 978-3-540-24546-9.

Many years ago Dick Lau, a program director at ONR, said to me, "I support some of you who work in matrix computations and you only seem to tackle three problems: (a) solve $Ax = b$, (b) find various least squares solutions, and (c) solve $Ax = Bx\lambda$. Why can't you solve them and go on to more advanced problems?" I did not have the wit to imitate Marvin Minsky[1] and respond, "Are there any other problems?" but replied lamely that while pure mathematicians could invoke military models of pushing back the frontiers of ignorance and had no need to keep reproving their theorems, we who worked in the service of computer users had to tackle the bottlenecks in their computations, and these seemed to fall under one of the three categories above. Although the categories may be the same, what goes on underneath has changed out of all recognition.

Επίλυση γραμμικών συστημάτων

Γενική συνοπτική περιγραφή:

Ορίζονται m γραμμικές εξισώσεις ως προς n ανεξάρτητες μεταβλητές, $x = (\xi_1, \dots, \xi_n)^\top$, ή $f(x) = b$, ή

$$
\begin{array}{rcl}
f_1(x) = \beta_1, \text{ δηλ. } \alpha_{1,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{1,n}\xi_n & = & \beta_1 \\
\dots & \vdots & \dots \\
f_m(x) = \beta_m, \text{ δηλ. } \alpha_{m,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{m,n}\xi_n & = & \beta_m
\end{array}
$$

και θέλουμε να υπολογίσουμε το x για το οποίο ικανοποιούνται οι εξισώσεις κατά τον καλύτερο δυνατό τρόπο.

Επίλυση γραμμικών συστημάτων

Γενική συνοπτική περιγραφή:

Ορίζονται m γραμμικές εξισώσεις ως προς n ανεξάρτητες μεταβλητές, $x = (\xi_1, \ldots, \xi_n)^\top$, ή $f(x) = b$, ή

$$\begin{array}{rcl} f_1(x) = \beta_1, \text{δηλ. } \alpha_{1,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{1,n}\xi_n & = & \beta_1 \\ \ldots & \vdots & \ldots \\ f_m(x) = \beta_m, \text{δηλ. } \alpha_{m,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{m,n}\xi_n & = & \beta_m \end{array}$$

και θέλουμε να υπολογίσουμε το x για το οποίο ικανοποιούνται οι εξισώσεις κατά τον καλύτερο δυνατό τρόπο.Συνοψίζοντας τους συντελεστές με το μητρώο A, διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

$m = n$ **εύρεση** x **τ.ώ.** $Ax = b$

Επίλυση γραμμικών συστημάτων

Γενική συνοπτική περιγραφή:

Ορίζονται m γραμμικές εξισώσεις ως προς n ανεξάρτητες μεταβλητές, $x = (\xi_1, \ldots, \xi_n)^\top$, ή $f(x) = b$, ή

$$\begin{aligned} f_1(x) = \beta_1, \text{δηλ. } \alpha_{1,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{1,n}\xi_n &= \beta_1 \\ \ldots &\vdots \ldots \\ f_m(x) = \beta_m, \text{δηλ. } \alpha_{m,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{m,n}\xi_n &= \beta_m \end{aligned}$$

και θέλουμε να υπολογίσουμε το x για το οποίο ικανοποιούνται οι εξισώσεις κατά τον καλύτερο δυνατό τρόπο.Συνοψίζοντας τους συντελεστές με το μητρώο A, διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

$m = n$ **εύρεση** x **τ.ώ.** $Ax = b$ → Κεφ. 5, 7

Επίλυση γραμμικών συστημάτων

Γενική συνοπτική περιγραφή:

Ορίζονται m γραμμικές εξισώσεις ως προς n ανεξάρτητες μεταβλητές, $x = (\xi_1, \ldots, \xi_n)^\top$, ή $f(x) = b$, ή

$$\begin{aligned}
f_1(x) = \beta_1, \text{δηλ. } \alpha_{1,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{1,n}\xi_n &= \beta_1 \\
\ldots &\vdots \ldots \\
f_m(x) = \beta_m, \text{δηλ. } \alpha_{m,1}\xi_1 + \cdots + \alpha_{m,n}\xi_n &= \beta_m
\end{aligned}$$

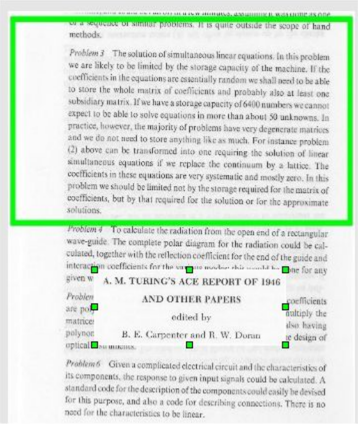
και θέλουμε να υπολογίσουμε το x για το οποίο ικανοποιούνται οι εξισώσεις κατά τον καλύτερο δυνατό τρόπο.Συνοψίζοντας τους συντελεστές με το μητρώο A, διακρίνουμε τις εξής περιπτώσεις:

- $m = n$ **εύρεση** x **τ.ώ.** $Ax = b \rightarrow$ Κεφ. 5, 7
- $m \neq n$ εύρεση/επιλογή βέλτιστου $x \in \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|b - Ax\| \rightarrow$ Κεφ. 6

‘Μητέρα’ των προβλημάτων της Υπολ. ΓΑ

ΑΓΑ.1 **Δίνεται** $n \times n$ **μητρώο** A, **διάνυσμα** b, n **τιμών. Υπολογίστε** x **τ.ώ.** $Ax = b$.

ΑΓΑ.1 Δίνεται $n \times n$ μητρώο A, διάνυσμα b, n τιμών. Υπολογίστε x τ.ώ. $Ax = b$.



of a sequence of similar problems. It is quite outside the scope of hand methods.

Problem 3 The solution of simultaneous linear equations. In this problem we are likely to be limited by the storage capacity of the machine. If the coefficients in the equations are essentially random we shall need to be able to store the whole matrix of coefficients and probably also at least one subsidiary matrix. If we have a storage capacity of 6400 numbers we cannot expect to be able to solve equations in more than about 50 unknowns. In practice, however, the majority of problems have very degenerate matrices and we do not need to store anything like as much. For instance problem (2) above can be transformed into one requiring the solution of linear simultaneous equations if we replace the continuum by a lattice. The coefficients in these equations are very systematic and mostly zero. In this problem we should be limited not by the storage required for the matrix of coefficients, but by that required for the solution or for the approximate solutions.

Problem 4 To calculate the radiation from the open end of a rectangular wave-guide. The complete polar diagram for the radiation could be calculated, together with the reflection coefficient for the end of the guide and interaction coefficients for the ... one for any given w...

A. M. TURING'S ACE REPORT OF 1946

AND OTHER PAPERS

edited by

B. E. Carpenter and R. W. Doran

Problem 6 Given a complicated electrical circuit and the characteristics of its components, the response to given input signals could be calculated. A standard code for the description of the components could easily be devised for this purpose, and also a code for describing connections. There is no need for the characteristics to be linear.

Από P.T. Bonoli, ``Requirements for the Centre for Simulation of Wave Plasma Interactions'', 3/2013

Wave solvers represent electric field in purely spectral (AORSA) or semi-spectral (TORIC) basis functions:

- **AORSA matrix is completely dense and complex with size ~ $(3 \times N_x \times N_z)^2 \times 16$, where typically ($N_x$, N_z) ~ (257, 513) for a size ~ 2.5 TB. [N_x and N_z ar the number of spectral modes, assuming axial (ϕ) symmetry.]**

- **TORIC & TORLH matrices are block tri-diagonal with dense, complex blocks of size ~ $3 \times (3 \times 2 \times N_m)^2 \times N_\psi \times 16$, where for N_m ~ 1023 and N_ψ ~ 980 the size is ~ 1.8 TB.**

- **Solution is achieved through an LU factorization of the matrix with ScaLAPACK, with inversion time scaling as $(N_z)^3$ and $N_\psi \times (N_m)^3$.**

Παρατηρήσεις - υπενθυμίσεις

Υπενθύμιση: Ποτέ (σχεδόν) με Cramer. Στη συντριπτική πλειοψηφία των περιπτώσεων ΔΕΝ θέλουμε να υπολογίσουμε το αντίστροφο (ακόμα και αν το γράφουμε ή το «αναφέρουμε»).

Γιατί (1); Αυτό που ενδιαφέρει είναι να υπολογίσουμε το $Q = A^{-1}B$ ή $U = CA^{-1}$ ή γενικότερα $CA^{-1}B$ για δεδομένα B, C, όπου B έχει n γραμμές και το C έχει n στήλες.

Γιατί (2); Όπως αν θέλουμε να υπολογίσουμε το β/α για βαθμωτούς, κάνουμε διαίρεση και ΔΕΝ υπολογίζουμε πρώτα $\gamma := 1/\alpha$ και μετά $\gamma\beta$.

Γιατί (3); Το A^{-1} συνήθως δεν έχει κάποια ειδική δομή. Π.χ. αν το A τριδιαγώνιο (άρα αποθήκευση σε $\approx 3n$ θέσεις), το A^{-1} πυκνό (άρα αποθήκευση σε $\approx n^2$ θέσεις).

Γιατί (4); Ο υπολογισμός του A^{-1} στοιχίζει λίγο περισσότερο από το να λύσουμε ένα γραμμικό σύστημα.

Για $X = A^{-1}B$, αν $B \in \mathbb{R}^{n\times k}$ αρκεί να λύσουμε $AX = B$, δηλ. να λύσουμε k γραμμικά συστήματα με το ίδιο μητρώο συντελεστών οπότε θα αρκέσει μια μόνο παραγοντοποίηση, π.χ. LU.

Για $Y = CA^{-1}$, αν $C \in \mathbb{R}^{m\times n}$ έχουμε $YA = C \Rightarrow A^\top Y^\top = C^\top$, επομένως λύνουμε ως προς $Y^\top$ τα m γραμμικά συστήματα με το ίδιο μητρώο συντελεστών, $A^\top$, οπότε πάλι αρκεί μια μόνο παραγοντοποίηση.

Για $Z = CA^{-1}B$, θα μπορούσαμε να υπολογίσουμε $Z = C(A^{-1}B) = CX$ ή $Z = (A^{-\top}C^\top)B = Y^\top B$. Η σειρά υπολογισμών που ελαχιστοποιεί τις πράξεις εξαρτάται από τις σχέσεις μεταξύ των m, k, n.

Παράδειγμα: Στην ανάλυση δικτύων (π.χ. Social Networks) πολλές φορές θέλουμε να υπολογίσουμε το λεγόμενο σκορ του Katz για οποιουσδήποτε δύο κόμβους i, j του δικτύου. Αυτό ορίζεται ως

$$k_{i,j} := e_i^\top (I - \alpha A)^{-1} e_j$$

όπου A είναι το μητρώο γειτνίασης του γραφήματος (δικτύου) και α μία παράμετρος (επιλεγμένη έτσι ώστε το $I - \alpha A$ να είναι αντιστρέψιμο.

Πολυπλοκότητα επίλυσης γραμμικών συστημάτων (Strassen'69 ([Str69]))

Υποθέτουμε για ευκολία ότι όποτε απαιτείται αντιστροφή, τα μητρώα που εμπλέκονται είναι αντιστρέψιμα. Έστω η πλοκαδοποίηση του μητρώου με πλοκάδες μεγέθους $n/2 \times n/2$ και η παραγοντοποίηση block LU:

$$
\begin{aligned}
A &= \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} I & 0 \\ A_{21}A_{11}^{-1} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & \underbrace{A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}}_{\text{συμπλήρωμα Schur}} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
A^{-1} &= \begin{pmatrix} A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1} \\ 0 & S^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & 0 \\ -A_{21}A_{11}^{-1} & I \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} A_{11}^{-1} + A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & -A_{11}^{-1}A_{12}S^{-1} \\ -S^{-1}A_{21}A_{11}^{-1} & S^{-1} \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

Για το αντίστροφο χρειαζόμαστε:

1. Το A_{11}^{-1},
2. τα $A_{11}^{-1}A_{12}$ και $A_{21}A_{11}^{-1}$,
3. το $S^{-1} = (A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1}$,
4. τα $-S^{-1}(A_{21}A_{11}^{-1})$, $(A_{11}^{-1}A_{12})S^{-1}$,
5. και το $A_{11}^{-1} + (A_{11}^{-1}A_{12})S^{-1}(A_{21}A_{11}^{-1})$

Συνολικά

- 2 αντιστροφές μητρώων μεγέθους $n/2$, και
- 6 πολλαπλασιασμούς μητρώων μεγέθους $n/2$,
- 2 προσθέσεις μητρώων μεγέθους $n/2$, δηλ.

Επομένως $\boxed{T_{\mathrm{INV}}(n) = 2T_{\mathrm{INV}}(n/2) + 6T_{\mathrm{MUL}}(n/2) + 2T_{\mathrm{ADD}}(n/2)}$ και έπεται ότι

Θεώρημα

Αν το μητρώο A είναι αντιστρέψιμο, μπορούμε να υπολογίσουμε το αντίστροφό του με λιγότερες από $5.64n^{\log 7}$ αριθμητικές πράξεις.

<u>ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ</u>: Αν διαθέτουμε έναν υπερταχύ ($\Omega = O(n^{2+\mu})$ για $\mu < 1$), αλγόριθμο πολλαπλασιασμού μητρώων, μπορούμε να τον χρησιμοποιήσουμε άμεσα και να κατασκευάσουμε αλγόριθμο αντιστροφής με ίδια ασυμπτωτική πολυπλοκότητα!

Είδη μητρώων

<u>Αλγεβρικές ιδιότητες:</u>

- γενικό μητρώο (δηλ. καμία ιδιότητα)
- συμμτερικό ή ερμιτιανό ($A = A^*$), όπου A^* συμβολίζει το «συζυγές ανάστροφο» του A (αν $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ προφανώς $A^\top = A^*$.
- κανονικό ($AA^* = A^*A$)
- ΣΘΟ ($\forall x \neq 0, x^*Ax > 0$).
- πραγματικό ορθογώνιο, μιγαδικό ορθομοναδιαίο ($A^*A = I$)

<u>Δομικές ιδιότητες</u>

- τριγωνική, ζώνης, Hessenberg
- συμμετρική ($A = A^\top$), ερμιτιανή ($A = A^*$)
- Toeplitz, Hankel, Vandermonde, (low displacement rank matrices), ...

Βάσει του πλήθους μηδενικών

- πυκνό
- αραιό: $O(n)$ το πλήθος των μη μηδενικών τιμών για $n \times n$ μητρώο.

Προσοχή: τη δομή του μητρώου πρέπει να την αξιοποιούμε

1. στη μέθοδο επίλυσης,
2. στον τρόπο αποθήκευσης (επιλογή δομής δεδομένων),
3. στην υλοποίηση της μεθόδου: το πρόγραμμα πρέπει να ανταποκρίνεται στη δομή.

Παρατήρηση: Ορισμένες φορές αν το MV με το A μπορεί να εκτελεστεί με πράξεις λιγότερες από τετραγωνικές, συμβαίνει και η λύση του $Ax = b$ να μπορεί να υπολογιστεί ταχύτερα από το αναμενόμενο.

Παράδειγμα: Μητρώα FFT, circulant, Toeplitz επιδέχονται ταχύτερης διαχείρισης

Θεμελιώδης τεχνική: Μέθοδοι παραγοντοποίησης

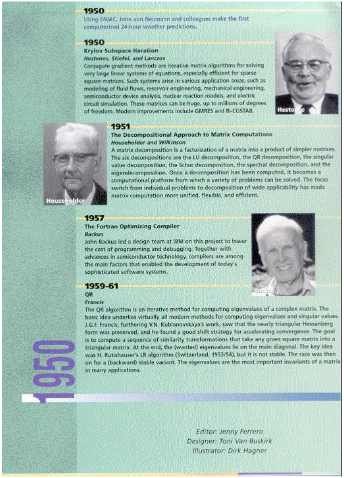
Εξαιρετικά σημαντική κατηγορία τεχνικών επίλυσης των βασικών προβλημάτων της υπολογιστικής γραμμικής άλγεβρας και όχι μόνον γραμμικών συστημάτων!

matrix decomposition

στην οποία θα αναφερόμαστε ως

διάσπαση ή παραγοντοποίηση μητρώου

- Οι περισσότερες τεχνικές παραγοντοποίησης αναπτύχθηκαν ανεξάρτητα
- η ενοποιημένη παρουσίασή τους οφείλει πολλά στον Alston Householder (1904-1993)
- αξίζει να δείτε το κλασικό του βιβλίο *The Theory of Matrices in Numerical Analysis* (1964)
- βλ. και το άρθρο του G.W. Stewart (Ste00) .



1950

Using ENIAC, John von Neumann and colleagues make the first computerized 24-hour weather predictions.

1950

Krylov Subspace Iteration

Hestenes, Stiefel, and Lanczos

Conjugate gradient methods are iterative matrix algorithms for solving very large linear systems of equations, especially efficient for sparse square matrices. Such systems arise in various application areas, such as modeling of fluid flows, reservoir engineering, mechanical engineering, semiconductor device analysis, nuclear reaction models, and electric circuit simulation. These matrices can be huge, up to millions of degrees of freedom. Modern improvements include GMRES and Bi-CGSTAB.

Hestenes

1951

The Decompositional Approach to Matrix Computations

Householder and Wilkinson

A matrix decomposition is a factorization of a matrix into a product of simpler matrices. The six decompositions are the LU decomposition, the QR decomposition, the singular value decomposition, the Schur decomposition, the spectral decomposition, and the eigendecomposition. Once a decomposition has been computed, it becomes a computational platform from which a variety of problems can be solved. The focus switch from individual problems to decomposition of wide applicability has made matrix computation more unified, flexible, and efficient.

Householder

1957

The Fortran Optimizing Compiler

Backus

John Backus led a design team at IBM on this project to lower the cost of programming and debugging. Together with advances in semiconductor technology, compilers are among the main factors that enabled the development of today's sophisticated software systems.

Backus

1959-61

QR

Francis

The QR algorithm is an iterative method for computing eigenvalues of a complex matrix. The basic idea underlies virtually all modern methods for computing eigenvalues and singular values. J.G.F. Francis, furthering V.N. Kublanovskaya's work, saw that the nearly triangular Hessenberg form was preserved, and he found a good shift strategy for accelerating convergence. The goal is to compute a sequence of similarity transformations that take any given square matrix into a triangular matrix. At the end, the (wanted) eigenvalues lie on the main diagonal. The key idea was H. Rutishauser's LR algorithm (Switzerland, 1953/54), but it is not stable. The race was then on for a (backward) stable variant. The eigenvalues are the most important invariants of a matrix in many applications.

1950

Editor: Jenny Ferrero
Designer: Toni Van Buskirk
Illustrator: Dirk Hagner

Οι κλασικές 6 ... και μερικές ακόμα

LU, PLU	
$LL^\top$	Cholesky
QR, QRP	
$V\Lambda V^\top$, $V\Lambda V^{-1}$	φασματική
$VTV^\top$	Schur
$U\Sigma V^\top$	SVD
QM	πολική (ορθογώνιο Q, ΣΘΟ M)
WH	μη αρνητική παραγοντοποίηση

Η κεντρική ιδέα είναι, δοθέντος του $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, να προσπαθήσουμε να υπολογίσουμε κατάλληλους παράγοντες C, D, E, τέτοιους ώστε

$$A = CDE \text{ ή γενικότερα } \quad A \approx CDE$$

όπου οι παράγοντες C, D, E είναι «απλούστεροι» αλλά εμπεριέχουν ό,τι χρειάζεται για το A.

$\boxed{\text{Ποια παραγοντοποίηση επιλέγουμε;}}$

Γενικά κριτήρια:

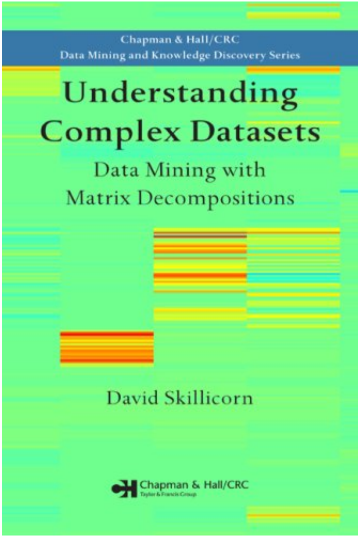
- το πρόβλημα που θέλουμε να λύσουμε
- τα αλγεβρικά χαρακτηριστικά του μητρώου (συμμετρικό ορισμένο, συμμετρικό ημιορισμένο, ...)
- τα δομικά χαρακτηριστικά του μητρώου (μέγεθος, πυκνότητα, ειδική μορφή (π.χ. Toeplitz), ...)
- το Υ/Σ (σειραϊκό, παράλληλο, ...)
- σε μεγάλα προβλήματα αναζητούμε οικονομικές προσεγγιστικές παραγοντοποιήσεις

Πλεονεκτήματα της μεθοδολογίας παραγοντοποίησης[1]

1. Μπορεί να εφαρμοστεί σε πολλών ειδών προβλήματα.
2. Μια παραγοντοποίηση μπορεί να επαναχρησιμοποιηθεί όταν το μητρώο παραμένει το ίδιο.
3. Η μεθοδολογία παραγοντοποίησης ενοποιεί πολλούς αλγορίθμους που συχνά υπολογίζουν το ίδιο αντικείμενο
4. Διευκολύνεται η ανάλυση σφάλματος α.κ.υ.
5. Πολλές παραγοντοποιήσεις προσφέρουν τη δυνατότητα οικονομικής ανανέωσης.
6. Επικεντρωνόμενοι σε λίγες παραγοντοποιήσεις που αποτελούν κοινό παρονομαστή πολλών ειδικότερων προβλημάτων, διευκολύνεται η οργάνωση και σχεδίαση σημαντικών βιβλιοθηκών.

[1] Από Stewart'00

«Αναρίθμητες» και νέες εφαρμογές

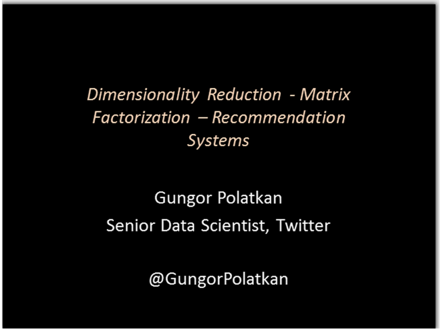



Fast Parallel PageRank: A Linear System Approach

David Gleich*
Stanford University, ICME
Stanford, CA 94305
dgleich@stanford.edu

Leonid Zhukov
Yahoo!
701 First Ave
Sunnyvale, CA 94089
zhukov@yahoo-inc.com

Pavel Berkhin
Yahoo!
701 First Ave
Sunnyvale, CA 94089
pberkhin@yahoo-inc.com



$$A = LU \quad \text{όπου } L, U \text{ κάτω και άνω τριγωνικά αντίστοιχα.}$$
$$A = QR \quad \text{όπου } Q, R \text{ ορθογώνιο και άνω τριγωνικό αντίστοιχα.}$$
$$A = Q\Lambda Q^{-1} \quad \text{όπου } \Lambda \text{ διαγώνιο.}$$

Παραδείγματα Έστω $Ax = b$ τότε $Q^{-1}AQQ^{-1}x = Q^{-1}b$ επομένως $\Lambda y = \hat{b}$.

Επομένως ένας τρόπος επίλυσης είναι να κάνουμε τα εξής βήματα:

1. Υπολογισμός των Q, Λ. Σημ. αυτό γίνεται μόνο μια φορά ανεξάρτητα από τον αριθμό των συστημάτων που ενδεχομένως πρέπει να λυθούν. Κόστος C_0.
2. Υπολογισμός του $\hat{b} := Q^{-1}b$, κόστος C_1.
3. Υπολογισμός του $\hat{x} := \Lambda^{-1}\hat{b}$, κόστος n αρ. πράξεις.
4. Υπολογισμός του $x = Q\hat{x}$, κόστος C_2.

Εφόσον το κόστος της επίλυσης με κλασικό τρόπο (π.χ. Gauss) είναι $O(n^3)$, θέλουμε

$$C_0 + C_1 + C_2 + O(n) < O(n^3)$$

Έστω ότι τα Q, Λ είναι ήδη γνωστά (άρα $C_0 = 0$. Τότε το ανωτέρω ισχύει αν $C_1, C_2 = O(n^2)$)

Ταξινόμηση κόστους επίλυσης κοινών συστημάτων με παραγοντοποιήση

Χωρίς να πούμε τίποτα για τους αλγόριθμους επίλυσης αλλά υποθέτοντας ότι δεν χρησιμοποιούμε υπερταχείες μεθόδους τύπου Strassen, ισχύει η παρακάτω ταξινόμηση:

Είδος A	Ω	**Είδος** A	Ω
διαγώνιο	n	διδιαγώνιο	$O(n)$
μητρώο ζώνης εύρους $\beta = p + q$	$O(npq)$	τριγωνικό	$O(n^2)$
ορθογώνιο	$O(n^2)$	Hessenberg	$O(n^2)$
ΣΘΟ	$\frac{1}{3}n^3 + O(n^2)$	γενικό	$\frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$

- Ο παραπάνω πίνακας δεν είναι πλήρης. Απουσιάζουν:
  - γενικά αραιά μητρώα
  - πυκνά δομημένα μητρώα (dense structured ή data sparse).
- Εξειδικευμένες μέθοδοι αναπτύσσονται σε άλλα μαθήματα (Επιστημονικός Υπολ. ΙΙ)

Βιβλιογραφία I

G.W. Stewart.
The decompositional approach in matrix computations.
IEEE Computing in Science and Engineering Magazine, pages 50--59, Jan-Feb. 2000.

V. Strassen.
Gaussian elimination is not optimal.
Numer. Math., 13:354--356, 1969.

Ε. Γαλλόπουλος.
Επιστημονικός Υπολογισμός I.
Πανεπιστήμιο Πατρών, 2008.

Χρήση Έργου Τρίτων I

1. http://epubs.siam.org/doi/pdf/10.1137/SIREAD000052000004000771000001 (βλ. σελ 6)
2. http://www.eecs.berkeley.edu/Faculty/Photos/Homepages/parlett.jpg (βλ. σελ 6)
3. http://www.amazon.com/Turings-Report-1946-Other-Papers/dp/0262031140 (βλ. σελ 8)
4. https://images-na.ssl-images-amazon.com/images/I/51Zb8B9kJML._UY250_.jpg (βλ. σελ 19)
5. https://www.cs.purdue.edu/homes/dgleich/publications/gleich2004-parallel.pdf (βλ. σελ 19)
6. https://www.brighttalk.com/webcast/9059/98819 (βλ. σελ 19)

Σημείωμα Αναφοράς

Τέλος Ενότητας

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης
ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ