Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα **5** : Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

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

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.

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
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
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

1. Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων
   - Απαλοιφή και LU: Οργάνωση των υπολογισμών
   - Οργάνωση με BLAS-3
   - Ανάλυση σφάλματος επίλυσης τετραγωνικών συστημάτων

Επανάληψη

- $\mathcal{O}$(πολυπλοκότητα αντιστροφής) $=$ $\mathcal{O}$(πολυπλοκότητα πολλαπλασιασμού)
- Η παραγοντοποίηση μητρώων βασικό εργαλείο υπολογισμών και ερμηνευτικότητας
- Επίλυση τριγωνικών συστημάτων:
  - Βάσει `DOT` ή `_AXPY`
  - BLAS-2 ή BLAS-3 (για πολλά δεξιά μέλη)
  - Πίσω ευστάθεια αλγορίθμων
  - Δείκτης κατάστασης προβλήματος
  - Φράγμα για το εμπρός σφάλμα

Βασικά θεωρήματα (1/2) (επανάληψη Γραμμικής Άλγεβρας)

Δίνεται $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Αν τα n κύρια υπομητρώα του $A(1:k, 1:k)$, $k = 1, ..., n$ είναι αντιστρέψιμα, τότε υπάρχουν κάτω τριγωνικό μητρώο L με όλα τα διαγώνια στοιχεία ίσα με την μονάδα και άνω τριγωνικό μητρώο U τέτοια ώστε $A = LU$. Οι παράγοντες L, U είναι μοναδικοί και η ορίζουσα του A ειναι ίση με το γινόμενο των διαγώνιων στοιχείων του U.

Υπάρχουν οι παράγοντες; Οι συνθήκες ύπαρξης είναι πολύ περιοριστικές (π.χ. δεν ισχύουν για το $A = [0, 1; 1, 1]$!) Γενικά. η απλή παραγοντοποίηση μπορεί να μην υπάρχει για πολλά μητρώα και για ακόμα περισσότερα να έχει αριθμητικά προβλήματα (π.χ. αν $A = [\mathtt{eps}, 1; 1, 1]$).
Το επόμενο θεώρημα δείχνει ότι με μια ελαφριά τροποποίηση, η παραγοντοποίηση ισχύει σχεδόν πάντα.

Βασικά θεωρήματα (2/2) (επανάληψη Γραμμικής Άλγεβρας)

Έστω μητρώο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Τότε υπάρχουν κάτω και άνω τριγωνικά μητρώα L και U αντίστοιχα και μεταθετικό μητρώο P ώστε $LU = PA$ όπου το L έχει μονάδες στη διαγώνιο και είναι αντιστρέψιμο.

Παρατήρηση: Το μητρώο $P^{\top}L$ είναι αυτό που στη MATLAB αποκαλείται «ψυχολογικά κάτω τριγωνικό» αν καλέσουμε την `lu` μόνο με δύο μεταβλητές εξόδου.

Σημαντικές περιπτώσεις (επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα)

Στοιχειώσες μητρώο (ΣΜ) Gauss: $E(u, e_k; 1) = I - u e_k^\top$ όπου

$$u = [\ \overbrace{0, \ldots, 0}^{k \text{ μηδενικά}}\ , \star, \ldots, \star]^\top .$$

- Τα ΣΜ Gauss είναι (κάτω) τριγωνικά
- τα διανύσματα u_k λέγονται διανύσματα Gauss. Προσέξτε ότι καθένα (για $k = 1, \ldots . n - 1$) χαρακτηρίζεται πλήρως από τα $n - k$ στοιχεία στις θέσεις $k + 1$ ως n.

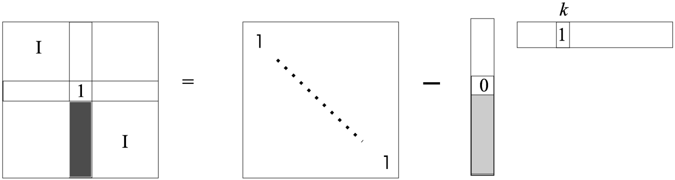
Στοιχειώδη (τριγωνικά) μητρώα **Gauss** και απαλοιφή (Επανάληψη από Γραμμική ’Αλγεβρα)

Επιλέγουμε, για κάποιο k ώστε $1 \leq k \leq n-1$:

$$\begin{aligned} t &= 1, v = e_k \\ u &= [0, \ldots, 0, \ldots, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n]^\top \text{ώστε } e_j^\top u = 0, j = 1:k \end{aligned}$$

Συμβολίζουμε $L_k(u) = E(u, e_k; 1)$

$E(u,e_k;\tau)$ στοιχειώδης μετασχηματισμός Gauss



Τότε:

$$L_k(u) = \left(\begin{array}{ccc|c|cccc}
1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\
0 & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\
\hline
0 & \cdots & 0 & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\
\hline
\cdots & \cdots & 0 & -\eta_{k+1} & 1 & \cdots & \cdots & 0 \\
\cdots & \cdots & 0 & -\eta_{k+2} & 0 & 1 & \cdots & 0 \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\
0 & \cdots & 0 & -\eta_n & 0 & \cdots & \cdots & 1
\end{array}\right),$$

Η αντιστροφή είναι τετριμμένη:

$$E(u, e_k; 1)E(u, e_k; -1) = I \Rightarrow (L_k(u))^{-1} = L_k(-u)$$

Εργαλείο μηδενισμού διαδοχικών στοιχείων διανύσματος: (Επανάληψη Γραμμικής)
Έστω $x = [\xi_1, ..., \xi_n]^T$ για το οποίο $\xi_k \neq 0$. Τότε

$$\begin{aligned} L_k(u)x &= x - ue_k^T x \\ &= x - u\xi_k \\ &= [\xi_1, ..., \xi_k, \xi_{k+1} - \xi_k\eta_{k+1}, ..., \xi_n - \xi_k\eta_n]^T. \end{aligned}$$

Από αυτό φαίνεται πως επιλέγοντας $\eta_j = \xi_j/\xi_k$ για $(k + 1 \leq j \leq n)$, ο μετασχηματισμός $L_k(u)$ μηδενίζει τα στοιχεία του x στις θέσεις $k + 1 : n$, ενώ αφήνει τα υπόλοιπα ανέπαφα.

Βελτιστοποιήσεις

- ο υπολογισμός του $L_k(u)$ είναι ανανέωση 1ης τάξης του ταυτοτικού I ...
- ... όμως το $L_k(u)$ δεν χρειάζεται ποτέ από μόνον του ...
- ... αντίθετα, χρειάζεται η δράση του επί διανυσμάτων ή μητρώων, π.χ. $L_k(u)y$, $L_k(u)A$,
- ... αξιοποιούμε τη δομή του L_k και υπολογίζουμε τη δράση του, όχι τις τιμές του:

$$\text{π.χ. επί διάνυσμα } y\text{: } L_k(u)y = (I - ue_k^\top)y = y - u\psi_k \Rightarrow \texttt{\_AXPY}$$

$$\text{π.χ. επί μητρώου } A\text{: } L_k(u)A = (I - ue_k^\top)A = A - uA(k,:) \Rightarrow \texttt{\_GER}$$

και αν επίσης, όπως ισχύει, $u_k = [0, \ldots, 0, \eta_{k+1}, \ldots, \eta_n]^\top$ τότε
Οι παραπάνω πράξεις επηρεάζουν μόνον τις γραμμές $k+1:n$ των y και A.
Κόστη: $2(n-k)$ για το $L_k(u)y$ και $2(n-k)n$ για το $L_k(u)A$

Λύση του ΑΓΑ.1 (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα)

Απαλοιφή Gauss Εφαρμόζουμε μετασχηματισμούς $L_k(u_k)$ διαδοχικά για $k = 1, \ldots, n-1$ στο επαυξημένο μητρώο $[A, b]$ μέχρι απαλοιφής όλων των στοιχείων που βρίσκονται κάτω από την (κύρια) διαγώνιο. Μετά λύνουμε το σύστημα που αποτελείται από το άνω τριγωνικό μητρώο και που έχει σαν δεξιό μέλος τον μετασχηματισμένο b.

Παραγοντοποίηση LU: Εφαρμόζουμε μετασχηματισμούς $L_k(u_k)$ διαδοχικά για $k = 1, \ldots, n-1$ μέχρι να μετατραπεί το A σε άνω τριγωνικό, οπότε

$$L_{n-1}(u_{n-1}) \cdots L_1(u_1)A = U$$

από το οποίο προκύπτει και ο παράγοντας L και συνεχίζουμε με την επίλυση των δυο τριγωνικών συστημάτων.

Παρατήρηση: Το 1ο βήμα της LU δεν λαμβάνει υπόψη το δεξιό μέλος b.
$\Rightarrow$ η παραγοντοποίηση μπορεί να γίνει άπαξ και μετά μπορούμε να την επαναχρησιμοποιήσουμε για όσα δεξιά μέλη θέλουμε.

Περιγραφή απαλοιφής (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα)

Η διαδικασία αρχίζει με την κατασκευή του μητρώου $A^{(0)} = A$. Στη συνέχεια, το μητρώο μετασχηματίζεται βαθμιαία

$$\begin{aligned} A^{(k)} &= L_k(u_k)A^{(k-1)}, k = 1, \ldots, n-1 \\ \text{οπότε} \quad & A^{(0)} \to A^{(1)} \to \cdots \to A^{(n-1)} \end{aligned}$$

- Το $A^{(k)}$ θα έχει μηδενικά κάτω από τη διαγώνιο στις στήλες 1 ως k και στο τέλος, ο $A^{(n-1)}$ είναι άνω τριγωνικός.
- όσα ενδιάμεσα αποτελέσματα χρειάζονται αποθηκεύονται στον ίδιο χώρο με το A
- Στο κάτω τριγωνικό τμήμα αποθηκεύουμε τα διανύσματα Gauss $u_1, \ldots, u_{n-1}$

Μέθοδος: (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα) Για να μετασχηματίσουμε το μητρώο στη μορφή $A^{(k-1)} \to A^{(k)}$, πρέπει να απαλείψουμε τα στοιχεία στις θέσεις $k+1:n$ της στήλης k αφαιρώντας πολλαπλάσια των στοιχείων στις θέσεις $k:n$ της k γραμμής από τα αντίστοιχα στοιχεία των γραμμών $j = k+1:n$.

Παρατηρήσεις

- Το διάνυσμα Gauss για την απαλοιφή των στοιχείων στις θέσεις $(k+1:n,k)$ είναι

$$u = [0, \ldots, 0, \overbrace{0}^{\text{θέση } k}, \frac{\alpha_{k+1,k}}{\alpha_{kk}}, \ldots \frac{\alpha_{n,k}}{\alpha_{kk}}]^\top$$

- Τα χρωματισμένα στοιχεία στις θέσεις $k+1:n$ αντιστοιχούν στο διάνυσμα $\frac{A(k+1:n,k)}{A(k,k)}$
- Τα στοιχεία αυτά αποθηκεύονται στο κάτω τριγωνικό τμήμα του A (δηλ. το L)

- Εφαρμόζεται ο μετασχηματισμός Gauss στο υπομητρώο $A(k:n, k:n)$:

$$\begin{aligned} A(k:n, k:n) &= (I - u(k:n)e_1^\top)A(k:n, k:n) \\ &= A(k:n, k:n) - u(k:n)e_1^\top A(k:n, k:n) \\ &= A(k:n, k:n) - u(k:n)A(k:n, k) \end{aligned}$$

- Επίσης: $u(k, k) = 0$ οπότε δεν επηρεάζεται η 1η γραμμή του $A(k:n, k)$.
- Επίσης: τα στοιχεία $A(k+1:n, k)$ θα γίνουν μηδέν από τον ορισμό του u.
-

$$\begin{aligned} A(k+1:n, k+1:n) &= A(k+1:n, k+1:n) - u(k+1:n)A(k, k+1:n) \\ &= A(k+1:n, k+1:n) - \frac{A(k+1:n, k)}{A(k, k)}A(k, k+1:n) \end{aligned}$$

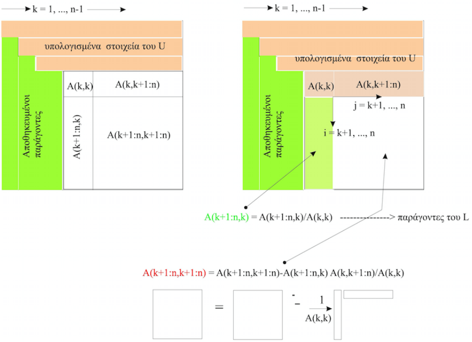
Στο βήμα $k = 1, ..., n-1$:

1. Τα στοιχεία της k στήλης στις θέσεις $(k+1:n)$ αντικαθίστανται με τα $\frac{A(k+1:n,k)}{A(k,k)}$. Αυτά αποτελούν την k στήλη του L.
2. Τα στοιχεία στις θέσεις $(k+1:n, k+1:n)$ αντικαθίστανται με τα:

$$A(k+1:n, k+1:n) = A(k+1:n, k+1:n) - \frac{A(k+1:n,k)}{A(k,k)} A(k, k+1:n)$$

   Τα στοιχεία στις θέσεις $(k, k:n)$ αποτελούν την k γραμμή του U.
3. Τα στοιχεία της διαγωνίου του L δεν αποθηκεύονται γιατί είναι έμμεσα γνωστά (μονάδες).

Στιγμιότυπο μετασχηματισμών



Απλή υλοποίηση

for $k = 1 : n-1$
    for $j = k+1 : n$
        for $i = k+1 : n$
            $\alpha_{i,k} = \frac{\alpha_{i,k}}{\alpha_{k,k}}$
            $\alpha_{i,j} = \alpha_{i,j} - \alpha_{i,k}\alpha_{k,j}$
        end
    end
end
	for $k = 1 : n-1$
	    for $i = k+1 : n$
	        $\alpha_{i,k} = \frac{\alpha_{i,k}}{\alpha_{k,k}}$
	        for $j = k+1 : n$
	            $\alpha_{i,j} = \alpha_{i,j} - \alpha_{i,k}\alpha_{k,j}$
	        end
	    end
	end

Παρατηρήστε:

- Οι δυο εσωτερικοί βρόχοι υλοποιούν ανανέωση (BLAS-2) του υπομητρώου στις θέσεις $(k+1:n, k+1:n)$
- Η σειρά των βρόχων στις δυο υλοποιήσεις είναι *kji* και *kij*

Παρατηρήσεις

Ο αλγόριθμος που περιγράψαμε,

- είτε τελείωνει πρόωρα έχοντας συναντήσει κάποιο μηδενικό $A(k,k)$,
- είτε υπολογίζει τα $n-1$ διανύσματα Gauss $u_k, k = 1:n-1$ ώστε το $L_{n-1}\cdots L_1 A = U$ να είναι άνω τριγωνικό.

Επομένως $A = L_1^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}U$. Γνωρίζουμε ότι $L_k^{-1} = I + u_k e_k^T$ και πως $L := L_1^{-1}\cdots L_{n-1}^{-1}$ είναι κάτω τριγωνικός με την μονάδα στην διαγώνιο. Από τον ορισμό των u_j, e_j, $u_j e_j^T u_k e_k^T = 0$ για $j < k$,

$$\begin{aligned} L &= (I + u_1 e_1^T)\cdots(I + u_{n-1}e_{n-1}^T) \\ &= I + \sum_{j=1}^{n-1} u_j e_j^T \end{aligned}$$

Κόστος

$$T_{\alpha\rho\theta}^{\mathrm{GAUSS.ELM/LU}} = \sum_{k=1}^{n-1}(n-k+2(n-k)^2) \approx \frac{2n^3}{3}$$

Όπως είδαμε η επίλυση των τριγωνικών συστημάτων απαιτεί $O(n^2)$ πράξεις.
Πολλά δεξιά μέλη Παραγοντοποιούμε το A (δηλ. κόστος $\alpha_1 n^3 + \alpha_2 n^2 + O(n)$) και μετά λύνουμε τα τριγωνικά συστήματα (δηλ. κόστος $s\beta n^2 + O(n)$). Το συνολικό κόστος είναι

$$\alpha_1 n^3 + (\alpha_2 + s\beta)n^2 + O(n)$$

άρα το κόστος επίλυσης ανά μέλος είναι

$$\alpha_1 \frac{n^3}{s} + \alpha_2 \frac{n^2}{s} + \beta n^2 + O(n).$$

Υλοποιήσεις

Το γενικό σχήμα υπολογισμού γράφεται και ως εξής:

```
for ? = ?:?
    for ? = ?:?
        for ? = ?:?
            α_ij = α_ij − α_ik α_kj / α_kk
        end
    end
end
```

$$\alpha_{ij} = \alpha_{ij} - \frac{\alpha_{ik}\alpha_{kj}}{\alpha_{kk}} \quad \text{όπου } i,j = k+1:n \text{ και } k = 1:n-1.$$

<u>Παρατηρήσεις</u>

- Οι κλασικές μέθοδοι έχουν για υπολογιστικό πυρήνα την ανανέωση BLAS-2

$$A(k+1:n,k+1:n) = A(k+1:n,k+1:n) - \frac{A(k+1:n,k)A(k,k+1:n)}{A(k,k)}$$

- επομένως περιορισμένη τοπικότητα.

Κίνητρο:

- $\Omega = \frac{2}{3}n^3 + O(n^2)$
- $\Phi_{\min} = n^2 + n, \quad \mu_{\min} \approx \frac{3}{2n}$
- $\Rightarrow$ δυνάμει τοπικότητα. Πώς την αξιοποιούμε;

Έστω σύμμορφος τεμαχισμός του A και των παραγόντων L, U

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix},$$

όπου $A_{11} \in \mathbb{R}^{(k-1)\beta \times (k-1)\beta}$, $A_{22} \in \mathbb{R}^{\beta \times \beta}$ και $A_{33} \in \mathbb{R}^{(n-k\beta)\times(n-k\beta)}$ ενώ τα L, U είναι τεμαχισμένα αντιστοίχως. Τότε

$$\begin{pmatrix} L_{11}U_{11} & L_{11}U_{12} & L_{11}U_{13} \\ L_{21}U_{11} & L_{21}U_{12} + L_{22}U_{22} & L_{21}U_{13} + L_{22}U_{23} \\ L_{31}U_{11} & L_{31}U_{12} + L_{32}U_{22} & L_{31}U_{13} + L_{32}U_{23} + L_{33}U_{33} \end{pmatrix},$$

Παράδειγμα

- Αν έχουμε υπολογίσει τις πρώτες $(k-1)\beta$ στήλες του L και τις $(k-1)\beta$ πρώτες γραμμές του U, δηλ. τα L_{11}, L_{21}, L_{31} και U_{11}, U_{12}, U_{13}.
- Πως μπορούμε να υπολογίσουμε τις επόμενες β στήλες του L και β γραμμές του U, δηλ. τα L_{22}, L_{32} και U_{22}, U_{23}.

$$\begin{pmatrix} L_{11}U_{11} & L_{11}U_{12} & L_{11}U_{13} \\ L_{21}U_{11} & L_{21}U_{12} + L_{22}U_{22} & L_{21}U_{13} + L_{22}U_{23} \\ L_{31}U_{11} & L_{31}U_{12} + L_{32}U_{22} & L_{31}U_{13} + L_{32}U_{23} + L_{33}U_{33} \end{pmatrix},$$

Από τον τεμαχισμό ισχύουν τα παρακάτω:

$$\begin{aligned}
A_{22} &= L_{21}U_{12} + \boxed{L_{22}U_{22}} \\
A_{32} &= L_{31}U_{12} + \boxed{L_{32}}U_{22} \\
A_{23} &= L_{21}U_{13} + L_{22}\boxed{U_{23}} \\
A_{33} &= L_{31}U_{13} + L_{32}U_{23} + \boxed{L_{33}U_{33}}
\end{aligned}$$

όπου εντός πλαισίου είναι οι παράγοντες που πρέπει να υπολογιστούν στο παρόν βήμα.

Συγκεντρώνουμε τις εξισώσεις για A_{22}, A_{32} σε μια ομάδα

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} A_{22} \\ A_{32} \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} L_{21} \\ L_{31} \end{bmatrix} U_{12} + \begin{bmatrix} \boxed{L_{22}} \\ \boxed{L_{32}} \end{bmatrix} U_{22} \\
A_{23} &= L_{21}U_{13} + L_{22}\boxed{U_{23}} \\
A_{33} &= L_{31}U_{13} + L_{32}U_{23} + \boxed{L_{33}U_{33}}
\end{aligned}$$

Μπορούμε τώρα να υλοποιήσουμε τις πράξεις χρησιμοποιώντας μόνον BLAS-3 και παραγοντοποίηση *LU* μητρώων μεγέθους $\beta \times \beta$.

1) $A_{22} - \begin{pmatrix} L_{21} \\ L_{31} \end{pmatrix} U_{12} = \boxed{\begin{pmatrix} L_{22} \\ L_{32} \end{pmatrix} U_{22}}$ με `sGEMM` και `sGETF2`

2) $A_{23} - L_{21}U_{13} = L_{22}\boxed{U_{23}}$ με `sGEMM` και `sGETRSM`

3) υπολ. $\hat{A}_{33} = A_{33} - L_{31}U_{13} - L_{32}U_{23}$ με `sGEMM`

4) *LU* παραγοντοποίηση του $\hat{A}_{33}$ επανάληψη των βημάτων 1 ως 4 (αναδρομή)

- `sGETF2` Πρόκειται για τυποποιημένη ονομασία υλοποίησης της κλασικής *LU* παραγοντοποίησης μητρώου με μερική οδήγηση (χωρίς BLAS-3) στη βιβλιοθήκη LAPACK (επόμενη διάλεξη). Θεωρούμε ότι η υλοποίηση γίνεται εξαιρετικά προσεκτικά με β επιλεγμένο με βάση το μέγεθος της cache.
- Η παραπάνω υλοποίηση <u>με οδήγηση</u> χρησιμοποιείται στο πρόγραμμα `sGETRF` της LAPACK (επόμενη διάλεξη).

Ανάλυση σφάλματος LU και επίλυσης

πάντα στο σύστημα a.k.u.

1. Πώς φράσσουμε το εμπρός σφάλμα
2. a posteriori και a priori
3. Διερεύνηση πίσω ευστάθειας (αποδεικνύεται συνήθως εκ των υστέρω αλλά γενικά δεν ισχύει πάντα)
4. Αποτέλεσμα Rigal-Gaches
5. Δείκτης κατάστασης προβλήματος
6. Παραδείγματα

Επισήμανση

Πολλά στοιχεία που χρησιμοποιούμε προέρχονται από τα σημαντικά συγγράμματα των Golub και van Loan (GV12), του N. Higham (Hig02) του J. Demmel (Dem97), και τη μονογραφία των F. Chatelin και V. Fraysse (CCF96).

Ανάλυση σφάλματος για την επίλυση συστήματος

Βήματα: Με βάση την μεθοδολογία ανάλυσης πίσω σφάλματος:

Κατάσταση αλγορίθμου: Προς τα πίσω ανάλυση σφάλματος.

$\rightarrow$ εύρεση δεδομένων $[A + \Delta A, b + \delta b]$ ώστε $(A + \Delta A)\tilde{x} = b + \Delta b$.

Κατάσταση προβλήματος: Πόσο αλλάζει το αποτέλεσμα για μικρές διαταραχές των στοιχείων εισόδου;

Εμπρός σφάλμα Εύρεση φράγματος με βάση τα μεγέθη $\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}$, $\frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$ και το δείκτη κατάστασης προβλήματος.

Κατάσταση προβλήματος

Θεώρημα

Αν για τα A, x, b ισχύει ότι $Ax = b$ τότε αν το μητρώο $A + \Delta A$ είναι αντιστρέψιμο, ισχύει επίσης ότι $(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b + \Delta b$ για κάποιο Δx για το οποίο

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right).$$

Συνήθως αρκούμαστε στην προσέγγισή του ως $\kappa(A)$ καθώς

$$\frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} = \kappa(A) + \kappa^2(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \cdots$$

<u>ΠΡΟΣΟΧΗ</u> Μερικές φορές οδηγεί σε υπερβολικά απαισιόδοξο φράγμα και υπάρχουν τρόποι βελτίωσης (δ.κ. Skeel)

Παρατήρηση

Προσοχή: Για να ισχύει το παραπάνω υποθέσαμε έμμεσα ότι

$$\begin{aligned} 0 &< 1 - \kappa(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} \\ &< 1 - \|A^{-1}\|\|\Delta A\| \end{aligned}$$

δηλ. $\|A^{-1}\|\|\Delta A\| < 1$.

Λήμμα

Έστω νόρμα μητρώου που ικανοποιεί τη σχέση $\|AB\| \leq \|A\|\|B\|$. Τότε αν $\|A\| < 1$ το μητρώο $I - A$ είναι αντιστρέψιμο και $(I - A)^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} A^j$ και $\|(I - A)^{-1}\| \leq 1/(1 - \|A\|)$.

ΕΡΩΤΗΣΗ: Πώς μπορούμε να συνδέσουμε το παραπάνω με μια πλήρη ανάλυση του σφάλματος;

- Αν δείχναμε ότι ένας συγκεκριμένος αλγόριθμος επίλυσης είναι πίσω ευσταθής, δηλ. ότι η υπολογισμένη λύση $\tilde{x}$ είναι η ακριβής λύση ενός παραπλήσιου συστήματος,

π.χ.

$$(A + \Delta A)\tilde{x} = b + \delta b$$

έτσι ώστε $\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}, \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}$ να είναι μικρά, π.χ. και φραγμένα από κάποιο μικρό ϵ. Τότε με βάση το παραπάνω φράγμα, μπορούμε να υπολογίσουμε άμεσα χρήσιμο άνω φράγμα για το εμπρός σφάλμα!

Πρακτικός «εκ των υστέρων» υπολογισμός πίσω σφάλματος

Για την επίλυση $Ax = b$

Έστω ότι υπολογίζουμε λύση $\hat{x}$ με κάποια μέθοδο, π.χ. LU και ότι $r = b - A\hat{x}$ τότε

$$\begin{aligned} \Delta A &= \frac{r\hat{x}^\top}{\hat{x}^\top\hat{x}} \\ (A+\Delta A)\hat{x} &= (b-r) + \frac{r\hat{x}^\top}{\hat{x}^\top\hat{x}}\hat{x} = (b-r) + r = b. \end{aligned}$$

Άρα

$$(A+\Delta A)\hat{x} = b, \text{ όπου } \|\Delta A\|_2 = \frac{\|r\|_2}{\|\hat{x}\|_2}.$$

Θεώρημα (Rigal+Gaches (τροποποιημένο))

Έστω ότι υπολογίστηκε η λύση $\hat{x}$ του συστήματος $Ax = b$ και ότι το κατάλοιπο είναι $r = b - A\hat{x}$. Τότε, το (εκ των υστέρων) πίσω σφάλμα μπορεί να οριστεί ως

$$\beta_N = \inf\{\omega | (A + \Delta A)\hat{x} = b, \|\Delta A\| \leq \omega \|A\|\}$$

και να υπολογιστεί ως

$$\beta_N = \frac{\|r\|}{\|A\|\|\hat{x}\|}$$

(μπορούμε να "αναθέσουμε σφάλμα" και στο b, οπότε $\beta_N = \frac{\|r\|}{\|A\|\|\hat{x}\|+\|b\|}$).

Σύνοψη ανάλυσης και πρακτικά φράγματα

Μικρές αλλαγές $\Delta A, \Delta b$ στα δεδομένα του προβλήματος «επίλυση γραμμικού συστήματος $Ax = b$» οδηγούν στο παρακάτω φράγμα για το εμπρός σχετικό σφάλμα:

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A)\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|}} \left(\frac{\|\Delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|} \right).$$

Αν εφαρμόσουμε έναν αλγόριθμο επίλυσης συστήματος, το (εκ των υστέρων) πίσω σφάλμα ορίζεται ως

$$\beta_N = \inf\{\omega | (A + \Delta A)\hat{x} = b, \|\Delta A\| \leq \omega \|A\|\}$$

όπου

$$\beta_N = \frac{\|r\|}{\|A\|\|\hat{x}\|}$$

Με βάση τα παραπάνω, αν γνωρίζουμε τα $\kappa(A), \hat{x}, r$ μπορούμε να εκτιμήσουμε ένα αξιόπιστο άνω φράγμα για το εμπρός σφάλμα ως εξής:

- υπολογίζουμε $\kappa(A)$,
- υπολογίζουμε $\beta_N = \frac{\|r\|}{\|A\|\|\hat{x}\|+\|b\|}$,
- και εφόσον $\beta_N \kappa(A) < 1$,

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{2\beta_N \kappa(A)}{1 - \kappa(A)\beta_N}$$

Παραδείγματα

Δεξί μέλος $b = A * \texttt{ones}(n, 1)$. Το `ferr2` είναι το παραπάνω φράγμα. Λύση μέσω '\' σε MATLAB 7.5.

Μητρώο	n	$\kappa_2(A)$	β_N	$\|x - \tilde{x}\|_2 / \|x\|_2$	`ferr2`
H	10	1.6e+13	5.0804e-017	2.7571e-004	0.0016
V	10	1.5e+07	3.6797e-017	3.3080e-010	1.1181e-009
R	100	1.7737e+003	2.2492e-016	5.2216e-014	7.9788e-013
Rn	100	684	5.0267e-016	1.3761e-014	6.8694e-013
D	100	1.0e+10	0	0	0
G	60	26.8	0.0156	0.4714	1.4317

- H : `hilb(n)` - μεγάλο $\kappa(A)$, μικρό πίσω σφάλμα
- V : `vander(linspace(0,1,10))` - μεγάλο $\kappa(A)$, μικρό πίσω σφάλμα
- R : `rand(n)` - μέτριο $\kappa(A)$, μικρό πίσω σφάλμα
- Rn : `randn(n)` - μέτριο $\kappa(A)$, μικρό πίσω σφάλμα
- D : `diag([1e-10,ones(1,n-1)])`, μεγάλο $\kappa(A)$, 0 πίσω σφάλμα, κακή εκτίμηση σφάλματος
- G : `gfpp(n)` - μικρό $\kappa(A)$, μεγάλο πίσω σφάλμα

Βιβλιογραφία I

F. Chaitin-Chatelin and V. Frayssé.
Lectures on Finite Precision Computations.
SIAM, Philadelphia, 1996.

J.W. Demmel.
Applied Numerical Linear Algebra.
SIAM, Philadelphia, 1997.

G.H. Golub and C.F. Van Loan.
Matrix Computations.
The Johns Hopkins University Press, Baltimore, 3d edition, 2012.

N.J. Higham.
Accuracy and Stability of Numerical Algorithms.
SIAM, Philadelphia, 2nd edition, 2002.

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

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών - Ευστράτιος Γαλλόπουλος 2015

``Επιστημονικός Υπολογισμός Ι'', Έκδοση: 1.0, Πάτρα 2013-2014.
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/CEID1096/

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