ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι

ΔΙΑΛΕΞΗ 12, 23/11/09

Ε. ΓΑΛΛΟΠΟΥΛΟΣ
Τμήμα Μηχ. Η/Υ και Πληροφορικής
Παν/μιο Πατρών

Επίλυση γενικών γραμμικών συστημάτων: Αριθμητικές πράξεις και Μεταφορές Ισχύει ότι:

Μεταφορές: $\phi_{\min} \approx n^2 + 2n$

Πράξεις: $\Omega = O(n^{3-\delta})$ όπου συνήθως $\delta = 0$ ή πολύ μικρό (βλ. ανάλυση πολυπλοκότητας)

$\Rightarrow \ \mu_{\min} = \frac{\phi_{\min}}{\Omega} \approx O(\frac{1}{n})$

Εγγενής τοπικότητα $\Rightarrow$ εφικτή η υλοποίηση μεθόδων που αξιοποιούν την cache

Βασικά θεωρήματα (1/2) (επανάληψη Γραμμικής Άλγεβρας)
Θεώρημα 1. *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.* □

Αλγόριθμος. [Μέθοδος παραγοντοποίησης LU]

Παραγοντοποίηση: υπολογίζουμε τους τριγωνικούς παράγοντες L, U,

Εμπρός αντικατάσταση: λύνουμε $Lz = b$ ως πρός z,

Πίσω αντικατάσταση: λύνουμε $Ux = z$ ώς πρός x.

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 $A = [\text{eps}, 1; 1, 1]$). Το επόμενο θεώρημα εφαρμόζεται πολύ πιο συχνά

Βασικά θεωρήματα (2/2) (επανάληψη Γραμμικής Άλγεβρας)
Θεώρημα 2. *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 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.

Επίλυση τριγωνικών συστημάτων

Έστω A κάτω τριγωνικό: Γράφουμε:

$$\alpha_{i,:}^T x = \beta_i, \quad 1 \le i \le n,$$

Υλοποίηση με BLAS-1 _DOT:

$$\xi_j \;=\; (\beta_j - \overbrace{\alpha_{j,1:j-1}^T \xi_{1:j-1}}^{\text{DOT}})/\alpha_{jj},\; j = 1, ..., n.$$

Ανάλυση

- $\Omega = \sum_{j=1}^n (1 + (2j-2)) = n^2$
- $\Phi_{\min} = \sum_{j=1}^n j + 2n$
- $\mu_{\min} = \frac{n+5}{2n} = \frac{1}{2} + O(\frac{1}{n})$

Οι αλγόριθμοι επίλυσης τριγωνικών συστημάτων με 1 δεξιό μέλος θεωρούνται BLAS-2.

Αν υπάρχουν s δεξιά μέλη:

- $\Omega = \sum_{j=1}^n (1 + (2j-2)) = sn^2$
- $\Phi_{\min} = \sum_{j=1}^n j + 2ns$
- $\mu_{\min} = \frac{n+4s+1}{2ns} = \frac{1}{2s} + O(\frac{1}{n})$

οπότε για $s \gg 1$ δεξιά μέλη η επίλυση κατατάσσεται στα *BLAS-3*.

Εναλλακτική υλοποίηση

Έστω A κάτω τριγωνικός:

$$b = \alpha_{:,1}\xi_1 + ... + \alpha_{:,n}\xi_n.$$

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_j \\ \vdots \\ \beta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} \\ \vdots \\ \alpha_{j1} \\ \vdots \\ \alpha_{n1} \end{pmatrix} \xi_1 + \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \alpha_{j2} \\ \vdots \\ \alpha_{n2} \end{pmatrix} \xi_2 + ... + \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \alpha_{nn} \end{pmatrix} \xi_n$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0_{1,n-1} \\ \alpha_{2:n,1} & A_{2:n,2:n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_{2:n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_{2:n} \end{pmatrix}$$

Το ξ_1 υπολογίζεται από

$$\begin{aligned} \alpha_{11}\xi_1 &= \beta_1 \\ A_{2:n,2:n}\xi_{2:n} &= \beta_{2:n} - \alpha_{2:n,1}\xi_1 \end{aligned}$$

Υλοποίηση με BLAS-1 sAXPY:

for $j = 1 : n-1$
  $\xi_j = \beta_j / \alpha_{jj}$
  for $i = j+1 : n$
    $\beta_i = \beta_i - \alpha_{ij}\xi_j$
  end
end

Ανάλυση σφάλματος επίλυσης τριγωνικού συστήματος

Ο αλγόριθμος επίλυσης τριγωνικού συστήματος $Lx = b$ έχει σαν πυρήνα: τις πράξεις:

for $i = 1 : n$
  $s = \sum_{j=1}^{i-1} \lambda_{ij}\xi_j$
  $\xi_i = \frac{\beta_i - s}{\lambda_{ii}}$
end

Χρησιμοποιώντας ακυ θεωρώντας ότι ξ, s είναι οι υπολογισμένες μεταβλητές, έχουμε

$$\begin{aligned} \xi_i &= \mathrm{fl}\left(\frac{\beta_i - s}{\lambda_{ii}}\right) \\ &= \frac{(\beta_i <1> - s <1>)}{\lambda_{ii}} <1> \end{aligned}$$

άρα

$$\frac{\xi_i \lambda_{ii}}{<2>} = \beta_i - s$$

Το s προέρχεται από εσωτερικό γινόμενο για το οποίο γνωρίζουμε ότι

$$s = \xi_1\lambda_{i1} <i-1> + \xi_2\lambda_{i2} <i-1> + \cdots \xi_{i-1}\lambda_{i,i-1} <2>$$

επομένως

$$\beta_i = \sum_{j=1}^{i} \xi_j \lambda_{ij}(1 + \theta_{i,k_j}) \;\; 2 \le k_j \le i$$

όπου

$$|\theta_{i,k_j}| \le \frac{k_j u}{1 - k_j u} \le \frac{nu}{1 - nu} = \gamma_n$$

Επομένως το υπολογισθέν x ικανοποιεί τη σχέση

$$b = (L + \Delta L)x$$

όπου τα στοιχεία του ΔL είναι φραγμένα

$$|\Delta L| \le \gamma_n |L|$$

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑ Η επίλυση τριγωνικών συστημάτων με τον αλγόριθμο βασισμένο σε DOT είναι πίσω σταθερή. Μπορούμε να δείξουμε το ίδιο και για τον αλγόριθμο που βασίζεται σε _AXPY.
ΣΥΣΤΑΣΗ Να δοκιμάσετε το παραπάνω στην επίλυση τριγωνικού συστήματος 4×4 για να καταλάβετε τη διαδικασία.

Η επίλυση τριγωνικών συστημάτων ως εντολές σε BLAS API

BLAS-2: _ `trsv`	επίλυση $Ax = b$
BLAS-3: _ `trsm`	επίλυση $AX = B$ (περισσότερα δεξιά μέλη)
_ `trcon`	εκτίμηση του δείκτη κατάστασης
_ `trtrs`	επίλυση $AX = B$ και $A^T X = B$
_ `trtri`	υπολογισμός A^{-1}

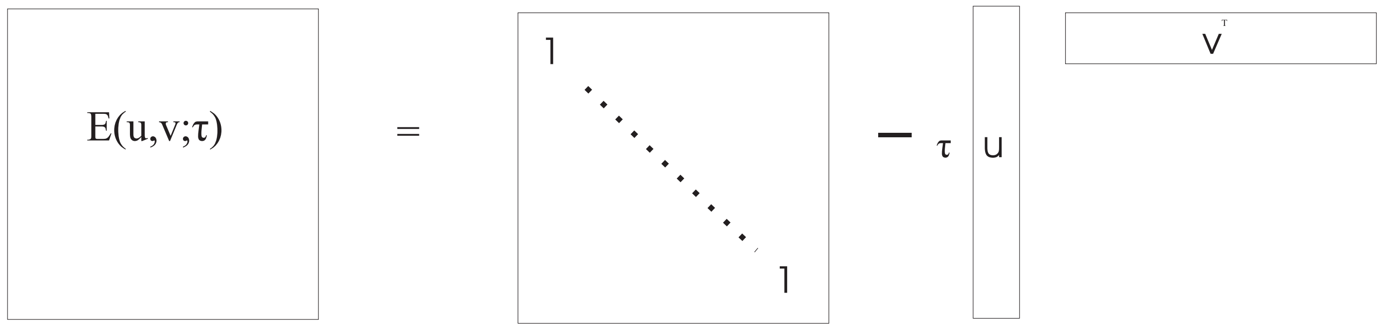
Σύνοψη για τριγωνικά συστήματα

- μεγάλης σημασίας στις εφαρμογές: ψηφίδες για $LU, LL^\top, QR$, αυτοτελώς (π.χ. γραμμικές αναδρομές) συχνά ως *τριγωνικά μητρώα ζώνης*.
- μέθοδοι επίλυσης για 1 δεξιό μέλος βασίζονται σε `DOT, SAXPY`
- και $\Omega = n^2$, $\phi_{\min} = O(n^2)$
- κατηγοριοποιούνται ως BLAS-2 API και αν πολλά δεξιά μέλη τότε BLAS-3
- Η MATLAB ανιχνεύει την «τριγωνικότητα»
- ... ακόμα και αν είναι «ψυχολογική»!!
- ... είδαμε στο μάθημα τι σημαίνει στη MATLAB psychologically lower triangula matrix.
- Είδαμε ότι οι κλασικοί αλγόριθμοι επίλυσης *πίσω ευσταθείς*.
- ... επομένως το μέγιστο εμπρός σφάλμα καθορίζεται από το δείκτη κατάστασης του μητρώου
- π.χ. για $Lx = b$, υπάρχει $|\Delta L| \le \gamma_n |L|$ τέτοιο ώστε $b = (L + \Delta L)\tilde{x}$.
- χρήσιμο όταν εξετάζουμε την ευστάθεια επίλυσης συστημάτων με LU

Στοιχειώδη μητρώα (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα) Είναι μητρώα της μορφής:

$$\boxed{E(u, v; \tau) := I_n - \tau u v^\top},$$

όπου $u, v \in \mathbb{R}^n$ n-διανύσματα και τ βαθμωτός.



- Τα στοιχειώδη μητρώα είναι εργαλεία για την πραγματοποίηση βασικών παραγοντοποιήσεων (κυρίως LU και QR).

Σημαντικές περιπτώσεις (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα)

ΣΜ Gauss: $E(u, e_k; 1) = I - ue_k^\top$ όπου $u = [\overbrace{0, ..., 0}^{k \text{ μηδενικά}}, \star, \ldots, \star]^\top$.

ΣΜ Householder: $E(u, u; 2/u^\top u) = I - \frac{2}{u^\top u} uu^\top$

- Τα ΣΜ Gauss είναι (κάτω) τριγωνικά $\leadsto$ άνω τριγωνιοποίηση $A \to U$ (κεφ. 5)
- τα διανύσματα u_k λέγονται διανύσματα Gauss. Προσέξτε ότι καθένα (για $k = 1, ...n-1$) χαρακτηρίζεται πλήρως από τα $n-k$ στοιχεία στις θέσεις $k+1$ ως n.
- Τα ΣΜ Householder είναι ορθογώνια $\leadsto$ άνω τριγωνιοποίηση $A \to R$ (κεφ. 6).
- Τα ΣΜ Householder χαρακτηρίζονται πλήρως από το διάνυσμα u (κεφ. 6).
- ... μπορούμε να το κανονικοποιήσουμε ώστε το πρώτο μη μηδενικό του στοιχείο να είναι 1 (κεφ. 6).

Πώς το επιτυγχάνουμε με ΣΜ Gauss;

- Γνωρίζετε την κλασική απαλοιφή Gauss ως διαδικασία αφαίρεσης πολλαπλάσιου της «γραμμής» του «οδηγού» από τις παρακάτω γραμμές ώστε να μηδενιστούν τα στοιχεία κάτω από τον οδηγό, π.χ. αν είναι η γραμμή k, αφαιρούμε πολλαπλάσια της γραμμής από τις γραμμές $k+1, ..., n$
- Πολλαπλασιάζουμε το υπό τριγωνιοποίηση μητρώου με κατάλληλο ΣΜ Gauss από τα αριστερά

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\rho & 1 & 0 \\ -\sigma & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \alpha_{21}-\rho\alpha_{11} & \alpha_{22}-\rho\alpha_{12} & \alpha_{23}-\rho\alpha_{13} \\ \alpha_{31}-\sigma\alpha_{11} & \alpha_{32}-\sigma\alpha_{12} & \alpha_{33}-\sigma\alpha_{13} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -\rho & 1 & 0 \\ -\sigma & 0 & 1 \end{pmatrix} = I - \begin{pmatrix} 0 \\ \rho \\ \sigma \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = I - u_1 e_1^\top \Rightarrow (I - u_1 e_1^\top)^{-1} = I + u_1 e_1^\top$$

Για μηδενοποίηση θέτουμε

$$\rho := \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}}, \quad \sigma := \frac{\alpha_{31}}{\alpha_{11}}$$

<u>Ερμηνεία με συμπλήρωμα Schur (1/2)</u>

$$\left(\begin{array}{c|cc} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \hline \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} \end{array}\right) = \left(\begin{array}{c|cc} 1 & 0 & 0 \\ \hline \alpha_{21}(\alpha_{11})^{-1} & 1 & 0 \\ \alpha_{31}(\alpha_{11})^{-1} & 0 & 1 \end{array}\right)\left(\begin{array}{c|cc} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} \\ \hline 0 & \alpha_{22}-\alpha_{21}(\alpha_{11})^{-1}\alpha_{12} & \alpha_{23}-\alpha_{21}(\alpha_{11})^{-1}\alpha_{13} \\ 0 & \alpha_{32}-\alpha_{31}(\alpha_{11})^{-1}\alpha_{12} & \alpha_{33}-\alpha_{31}(\alpha_{11})^{-1}\alpha_{13} \end{array}\right)$$

Με τον παραπάνω τεμαχισμό,

$$\begin{aligned} A_{21}A_{11}^{-1} &= \begin{pmatrix} \alpha_{21}\alpha_{11}^{-1} \\ \alpha_{31}\alpha_{11}^{-1} \end{pmatrix}, \\ S = A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} &= \begin{pmatrix} \alpha_{22} - \alpha_{21}\alpha_{11}^{-1}\alpha_{12} & \alpha_{23} - \alpha_{21}\alpha_{11}^{-1}\alpha_{13} \\ \alpha_{32} - \alpha_{31}\alpha_{11}^{-1}\alpha_{12} & \alpha_{33} - \alpha_{31}\alpha_{11}^{-1}\alpha_{13} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Θυμηθείτε ότι

<u>Ερμηνεία με συμπλήρωμα Schur (2/2)</u> Θυμηθείτε ότι

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

- το 1ο βήμα της γνωστής παραγοντοποίησης LU μοιάζει με την παραπάνω παραγοντοποίηση (block LU ή «σύνθετη LU» ή «κατά ομαθούς LU» για την ειδική περίπτωση που θέτουμε ως $A_{11} = \alpha_{11}$ (δηλ. βαθμωτό).
- Μπορούμε να δείξουμε παρόμοια αποτελέσματα (κατάλληλα παραλλαγμένα) για κάθε βήμα $k = 1, 2, ..., n-1$, της LU.
- Χρήσιμο γιατί έτσι κάθε βήμα της LU ερμηνεύεται και ως μια ανανέωση 1ης τάξης μητρώου $(n-k) \times (n-k$ (το A_{22}):

$$A_{k+1:n,k+1:n} = A_{k+1:n,k+1:n} - A_{k+1:n,k}\alpha_{kk}^{-1}A_{k,k+1:n}$$

- Προσέξτε ότι μπορούμε και κάνουμε την ανανέωση in-place. Αν θέλουμε δηλαδή, δεν χρειάζεται σημαντικός επιπλέον αποθηκευτικός χώρος για τη διαδικασία.
- Μπορούμε να αποθηκεύσουμε τα «διανύσματα Gauss» $u_1, \ldots, u_{n-1}$ και U στη θέση του A (περισσότερα σε επόμενη διάλεξη).

Μερικές γενικές ιδιότητες των ΣΜ (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα)

1. $E(u,v;\rho)E(u,v;\tau) = E(u,v;\rho+\tau-\rho\tau v^\top u)$:

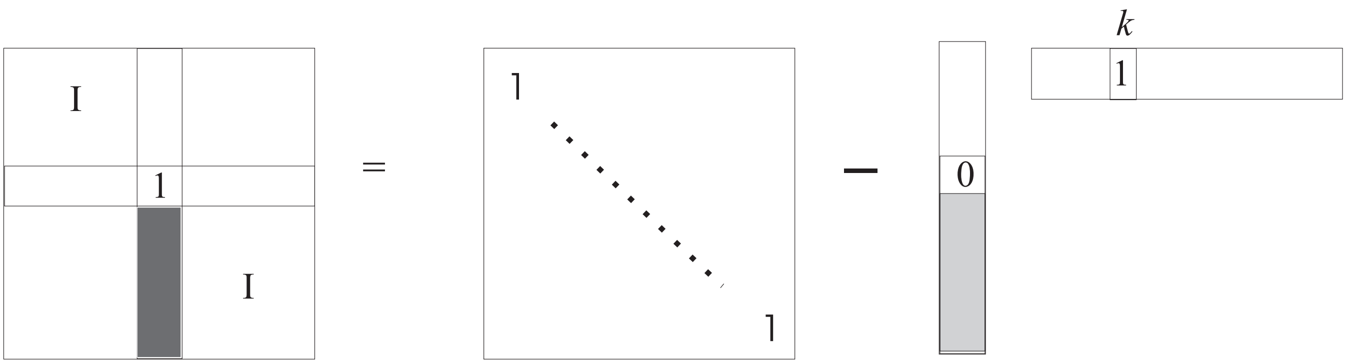
$$\begin{aligned} E(u,v;\rho)E(u,v;\tau) &= (I-\rho uv^\top)(I-\tau uv^\top) \\ &= I-(\rho+\tau)uv^\top + \rho\tau u(v^\top u)v^\top \end{aligned}$$

2. Επομένως, $\rho^{-1}+\tau^{-1} = v^\top u \Rightarrow E(u,v;\rho)E(u,v;\tau) = I$.
3. $\det E(u,v;\rho) = 1-\rho v^\top u$:
   Επαγωγή και χρήση της ιδιότητας $\det(A) = \det(L)\det(U) = \det(U)$.
4. $\min_{u,v,\rho} \operatorname{rank}(E) = n-1$:
   Από την ιδιότητα $\operatorname{rank}(A+B) \leq \operatorname{rank}(A)+\operatorname{rank}(B)$ και $A = I-\rho uv^\top$, $B = uv^\top$.

Στοιχειώδη (τριγωνικά) μητρώα **Gauss** (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα)
Είναι η περίπτωση που επιλέγουμε, για κάποιο k ώστε $1 \leq k \leq n-1$:

$$\begin{aligned} \tau &= 1 \\ v &= e_k \\ u &= [0,\ldots,0,\eta_{k+1},\ldots,\eta_n]^\top \text{ώστε } e_j^T u = 0, j = 1:k \\ \text{Συμβολίζουμε} \quad & L_k(u) := E(u,e_k;1) \end{aligned}$$

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



Τότε:

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

Ιδιότητες (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα) Η αντιστροφή είναι τετριμμένη:

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

Εργαλείο για μηδενισμό διαδοχικών στοιχείων διανύσματος: (Επανάληψη από Γραμμική Άλγεβρα)
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.

Ανάλυση: Ταχύτητα

- αν θέλαμε να υπολογίσουμε το $L_k(u)$, θα αντιστοιχούσε σε ανανέωση 1ης τάξης ...
- ... όμως το $L_k(u)$ δεν χρειάζεται ποτέ από μόνο του ...
- ... αντίθετα, χρειάζεται η δράση του επί διανυσμάτων ή μητρώων, π.χ. $L_k(u)y, L_k(u)A$,
- ... οπότε εκμεταλλευόμαστε τη δομή του:

$$\begin{aligned} L_k(u)y &= (I - ue_k^\top)y = y - u\psi_k \Rightarrow \text{SAXPY} \\ L_k(u)A &= (I - ue_k^\top)A = A - uA(k,:) \Rightarrow \text{SGER} \end{aligned}$$

και αν επίσης, όπως ισχύει, $u_k = [0, ..., 0, \eta_{k+1}, ..., \eta_n]^\top$ 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 $L_k(u)A$

__ Δοθέντος $x \in \mathbb{R}^n$ ώστε $\xi_1 \neq 0$ η GAUSS υπολογίζει διάνυσμα $u \in \mathbb{R}^{n-1}$ ώστε αν $y = L_1(u)x$ τότε $y(2:n) = 0$.

Αλγόριθμος.

function $u = \text{GAUSS}(x)$
  $n = \text{length}(x);$
  $u = x(2:n)/x(1)$
end

$$T_{\text{αρθ}}^{\text{GAUSS}} = n - 1$$

Εφαρμογή της Gauss
Δοθέντος $C \in \mathbb{R}^{n\times r}$ και μετασχηματισμού Gauss $L_k(u)$ ο ακόλουθος αλγόριθμος αντικαθιστά τον C με τον $L_k(u)C$.

Αλγόριθμος.
function $u = \text{GAUSS.MUL}(C, u)$
  $[n, m] = \text{size}(C);$
  $C(2:n, :) = C(2:n, :) - uC(1, :)$
end

$$T_{\text{αρθ}}^{\text{GAUSS.MUL}} = 2(n-1)r$$

$T_{\text{αρθ}}^{\text{GAUSS.MUL}} = 2(n-1)r$ πράξεις α.κ.υ.
Επίλυση συστημάτων με LU (Γνωστή ύλη!) Για $k = 1, ..., n-2$: α) Οδήγηση για επιλογή κατάλληλης γραμμής, β) υπολογίζουμε το κατάλληλο διάνυσμα Gauss u_k, γ) Εφαρμόζουμε το L_k λαμβάνοντα υπόψη τη δομή του, δηλ. ανανέωση 1ης τάξης μητρώου $(n-k) \times (n-k)$.

Η παραγοντοποίηση LU βασίζεται στη διαδοχική εφαρμογή των στοιχειωδών μετασχηματισμών Gauss $L_1, L_2, ..., L_{n-1}$. Με λίγη προσπάθεια φαίνεται ότι

$$L = L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} = I + \sum_{k=1}^{n-1} u_j e_j^\top.$$

Το ίδιο μπορεί να γίνει και όταν εφαρμόζουμε οδήγηση! Δηλ. να «απεμπλέξουμε» τα μητρώα εναλλαγής P_j:

$$L_{n-1}P_{n-1} \cdots L_1 P_1 A = UPA = LU$$

Διαδικασία LU (χωρίς οδήγηση) (Γνωστή ύλη!)

Αλγόριθμος.

function $A = \text{GAUSS.ELM}(A)$
  $k = 1$
  while $A(k,k) \neq 0$ και $k \leq n-1$
    $t = \text{GAUSS}(A(k:n,k))$ (* $t \in \mathbb{R}^{n-k}$ *)
    $A(k+1:n,k) = t$
    $A(k:n,k+1:n) = \text{GAUSS.MUL}(A(k:n,k+1:n),t)$
    $k = k+1$
  end
end

Κόστη (Ω) Παραγοντοποίηση LU:

$$\begin{aligned} T_{\text{αρθ}}^{\text{GAUSS.ELM}} &= \sum_{k=1}^{n-1}(n-k+2(n-k)^2) \\ &\approx \frac{2n^3}{3} \end{aligned}$$

Επίλυση: με $\approx 2n^2$

Για την επίλυση με το ίδιο μητρώο αλλά πολλά δεξιά μέλη εκτελούμε την LU μόνο μια φορά. Το συνολικό κόστος επίλυσης για s δεξιά μέλη είναι

$$\frac{2}{3}n^3 + O(sn^2)$$

Υλοποιήσεις LU με **BLAS-3** Κίνητρο:

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

Έστω σύμμορφος τεμαχισμός του A και των παραγόντων L, U

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L_{11} & 0 & 0 \\ L_{21} & L_{22} & 0 \\ L_{31} & L_{32} & L_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} & U_{13} \\ 0 & U_{22} & U_{23} \\ 0 & 0 & U_{33} \end{pmatrix}, \qquad (1)$$

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

- Έστω ότι έχουμε ήδη 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}.
- Θα δείξουμε πως μπορούμε να συνεχίσουμε υπολογίζοντας 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 BLAS-3

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`: τυποποιημένη ονομασία υλοποίησης της κλασικής LU παραγοντοποίησης μητρώου με μερική οδήγηση (χωρίς BLAS-3) στη βιβλιοθήκη LAPACK.

Η παραπάνω υλοποίηση με οδήγηση χρησιμοποιείται στο πρόγραμμα `sGETRF` της LAPACK

Παραγοντοποίηση με BLAS-3 και συμπλήρωμα **Schur** Είδαμε (π.χ. ανάλυση πολυπλοκότητας της αντιστροφής μητρώου) ότι αν έχουμε σύμμορφο τεμαχισμό του A και των παραγόντων L, U, με τετραγωνικά διαγώνια υπομητρώα ώστε να υπάρχει το A_{11}^{-1}, τότε

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ L_{21} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

όπου $A_{11} \in \mathbb{R}^{k\times k}$ και $A_{22} \in \mathbb{R}^{(n-k)\times(n-k)}$.
Έχουμε:

$$\begin{aligned} U_{11} &= A_{11} \\ U_{12} &= A_{12} \\ L_{21} &= A_{21}A_{11}^{-1} \\ U_{22} &= A_{22} - A_{21}A_{11}^{-1}A_{12} \end{aligned}$$

και ονομάσαμε το U_{22} συμπλήρωμα Schur του A_{11} στο A.

Κλασική LU - Σύνθετη LU

- Ονομάζουμε LU ή «κλασική LU» αλγορίθμους που επιστρέφουν L, U όπως τα συνηθίζουμε (κάτω τριγωνικό L ή PL, άνω τριγωνικό U).
- Ονομάζουμε block LU ή «σύνθετη LU» ή «LU κατά ορμαθούς» τους αλγορίθμους που επιστρέφουν παράγοντες L, U που μόνον ως σύνθετα μητρώα μπορούν να θεωρηθούν κάτω και άνω τριγωνικά αντίστοιχα.
- Προσοχή: Τα BLAS-3 μπορούν να χρησιμοποιηθούν και στις δύο περιπτώσεις.
- Γενικά, βιβλιοθήκες όπως η LAPACK χρησιμοποιούν κλασική LU υλοποιημένη με BLAS-3.

  Η block LU είναι χρήσιμη για ορισμένες ειδικές δομές μητρώων.

Εφαρμογή: Όταν το A περιέχει «απλό» υπομητρώο Σε πολλές εφαρμογές, μπορούμε να φέρουμε το A σε μορφή τέτοια ώστε ως σύνθετο μητρώο, το A_{11} να είναι πολύ απλό, π.χ. ταυτοτικό (ή διαγώνιο, τριδιαγώνιο, κλπ). Να δούμε τι γίνεται όταν είναι ταυτοτικό:

$$A = \begin{pmatrix} I & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I & 0 \\ A_{21} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & A_{12} \\ 0 & A_{22} - A_{21}A_{12} \end{pmatrix}$$

Για να λύσουμε το $Ax = b$ γράφουμε $x = [x_1, x_2]^T$ και $b = [b_1, b_2]^T$ οπότε μετά από την παραγοντοποίηση με ορμαθούς

$$\begin{pmatrix} I & 0 \\ A_{21} & I \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I & A_{12} \\ 0 & A_{22} - A_{21}A_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

οπότε αν λύσουμε με τον κλασικό τρόπο ($(L(\overbrace{Ux}^{y}) = b$) έχουμε να υπολογίσουμε

$$y_1 = b_1, \boxed{y_2} = b_2 - A_{21}y_1$$

και

$$(A_{22} - A_{21}A_{12})\boxed{x_2} = y_2, \boxed{x_1} = y_1 - A_{12}x_2$$

Μπορείτε να το εφαρμόσετε και να συγκρίνετε με τον κλασσικό τρόπο επίλυσης.
Παρατηρήσεις

- Το συμπλήρωμα Schur υπολογίζεται εύκολα λόγω της τετριμμένης μορφής του A_{11}.
- Ακολουθώντας παρόμοια τακτική, μπορούμε να απλοποιήσουμε τους υπολογισμούς όταν το A_{11} είναι της μορφής ρI, ή διαγώνιο ή ακόμα και μητρώο του οποίου η επίλυση έχει γραμμική πολυπλοκότητα, π.χ. διδιαγώνιο ή τριδιαγώνιο!
- *Ο παραπάνω τρόπος επίλυσης δεν είναι ισοδύναμος με την κλασσική παραγοντοποίηση* LU.
- ... επιπλέον, πρέπει τα αντίστοιχα συμπληρώματα Schur να είναι αντιστρέψιμα.
- ΣΥΣΤΑΣΗ: Δοκιμάστε την ίδια μέθοδο όταν το A_{11} είναι διαγώνιο ή διδιαγώνιο ή τριγωνικό ....