Για μεγάλα συστήματα εξισώσεων:
— Επαναληπτικές μέθοδοι
— Αραιοί πίνακες
— Παράλληλη επεξεργασία

Μέρη υπολογιστικού project

1) Άμεσες μέθοδοι επίλυσης γραμμικών συστημάτων (παραγοντοποίηση LU / Cholesky) με ρουτίνες GSL (GNU Scientific Library) www.gnu.org/software/gsl
2) Επαναληπτικές μέθοδοι γραμμικών συστημάτων (Conjugate Gradient / GMRes)
3) Αραιοί πίνακες (Sparse matrices) με το πακέτο ρουτινών CSparse
4) Μέθοδοι παράλληλης επεξεργασίας (Intel Math Kernel Library - MKL σε multi-cores, nVIDIA CUDA σε GPUs)
5) Προσομοίωση συστημάτων στο πεδίο του χρόνου (επίλυση γραμμικών συστημάτων σε διαδοχικές χρονικές στιγμές)

Μέθοδοι επίλυσης γραμμικών συστημάτων

Σύστημα γραμμικών εξισώσεων: $A\underline{x} = \underline{b}$,

$A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ (τετραγωνικός και αντιστρέψιμος $n\times n$ πίνακας),

$\underline{x}, \underline{b} \in \mathbb{R}^n$ ($n\times 1$ διανύσματα αγνώστων και δεξιού μέλους)

Άμεσες (direct) μέθοδοι επίλυσης: τερματίζουν σε έναν προκαθορισμένο αριθμό πράξεων.

Παραγοντοποίηση LU

Εάν $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι αντιστρέψιμος τότε υπάρχουν μοναδικοί πίνακες

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ l_{31} & l_{32} & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n3} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$ (μοναδιαίος κάτω τριγωνικός)

$$U = \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2n} \\ 0 & 0 & u_{33} & \cdots & u_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{pmatrix}$$ (άνω τριγωνικός)

τέτοιοι ώστε $PA = LU$,
όπου $P \in A^{n\times n}$ πίνακας __μετάθεσης__ (permutation) ο οποίος προκύπτει από τον μοναδιαίο πίνακα I_n $(n\times n)$ με __εναλλαγές γραμμών__

[π.χ. για $n=4$ και εναλλαγή γραμμών $2 \leftrightarrow 4$
θα είναι $P = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$]

Ο πίνακας PA προκύπτει από τον A με τις ίδιες εναλλαγές γραμμών, και υλοποιεί τη λειτουργία της __μερικής οδήγησης__ (partial pivoting $\Leftrightarrow$ εναλλαγές γραμμών).

Κατά τις εναλλαγές γραμμών η μερική οδήγηση επιλέγεται η γραμμή-εξίσωση με το __μεγαλύτερο__ (κατ' απόλυτη τιμή) διαγώνιο στοιχείο κατά το τρέχον βήμα, ώστε να αποφευχθεί τυχόν διαίρεση με 0 (αν το τρέχον διαγώνιο στοιχείο είναι 0) ή απώλεια αριθμητικής ακρίβειας (αν το τρέχον διαγ. στοιχείο είναι πολύ μικρό)

Κώδικας αλγορίθμου παραγοντοποίησης LU:

```
for k = 1, ..., n
    x = |a_kk|
    for i = k, ..., n
        if |a_ik| > x then m = i
    INTERCHANGE rows k and m
```
partial pivoting $\Leftrightarrow$ row permutation

```
    if |a_jk| > λ then m = i
INTERCHANGE rows k and m
for i = k+1, ..., n
    a_ik = l_ik = a_ik / a_kk
for i = k+1, ..., n
    for j = k+1, ..., n
        a_ij = a_ij - l_ik a_kj
```

Η πολυπλοκότητα της παραγοντοποίησης LU είναι $O(n^3)$

Έλεγχος της k στήλης για το <u>μεγαλύτερο</u> στοιχείο $|a_{ik}^{(k)}|$ $(i=k,\dots,n)$, και εναλλαγή της τρέχουσας γραμμής k με τη γραμμή $m \geq k$ όπου εμφανίζεται το μέγιστο στοιχείο

* Κατά τη μερική οδήγηση (ή εναλλαγή γραμμών) πρέπει να υπάρχει και εναλλαγή των στοιχείων b_k και b_m του διανύσματος $\underline{b}$, ταυτόχρονα με την εναλλαγή των γραμμών k και m του A.

Πράγματι, το γραμμικό σύστημα $A\underline{x}=\underline{b}$ γράφεται ισοδύναμα:

$A\underline{x}=\underline{b} \Leftrightarrow PA\underline{x}=P\underline{b} \Leftrightarrow LU\underline{x}=P\underline{b}$

<u>Υπολογιστική λεπτομέρεια</u>. Οι μεταθέσεις γραμμών αντί για πίνακα μεταθέσεων P αποθηκεύονται σε <u>διάνυσμα</u> μεταθέσεων $\underline{p} \in \mathbb{R}^n$ που προκύπτει από το διάνυσμα $[1,2,\dots,n]$ με τις εναλλαγές $k \leftrightarrow m$ κατά την εκτέλεση του αλγορίθμου.

Το διάνυσμα $P\underline{b}$ θα είναι τότε $P\underline{b}=[b_{p_1}, b_{p_2}, \dots, b_{p_n}]$

$(\pi.\chi.\ [b_3, b_2, b_4, b_1]$ εάν $\underline{p}=[3,2,4,1])$

* Κατά την προσομοίωση συστημάτων στο πεδίο του χρόνου πρέπει να επιλυθούν πολλά συστήματα με ίδιο πίνακα A αλλά διαφορετικά δεξιά μέλη $\underline{b}_1, \underline{b}_2, \dots$

(συστήματα $A\underline{x}_1 = \underline{b}_1$, $A\underline{x}_2 = \underline{b}_2$, ...)
τότε πραγματοποιείται παραγοντοποίηση LU μία φορά, και εφαρμόζονται οι μεταθέσεις γραμμών που προέκυψαν (και αποθηκεύτηκαν στο διάνυσμα $\underline{p}$) σε κάθε δεξί μέλος $\underline{b}_1$, $\underline{b}_2$, ...

Παραγοντοποίηση Cholesky

Εάν $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι πίνακας συμμετρικός (δηλ. $A = A^T$) και θετικά ορισμένος (δηλ. $\underline{x}^T A \underline{x} > 0 \ \forall \underline{x} \in \mathbb{R}^n, \underline{x} \neq 0$) τότε υπάρχει μοναδικός κάτω τριγωνικός πίνακας L τέτοιος ώστε $A = LL^T$ (χωρίς πίνακα μετάθεσης P)

Αλγόριθμος παραγοντοποίησης Cholesky:

for $k = 1, \ldots, n$

$$\ell_{kk} = \sqrt{a_{kk} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{kj}^2}$$

for $i = k+1, \ldots, n$

$$a_{ik} = \ell_{ik} = \frac{1}{\ell_{kk}}\left(a_{kj} - \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{ij}\ell_{kj}\right)$$

Αν ο πίνακας A δεν είναι συμμετρικός και θετικά ορισμένος (symmetric and positive definite ή SPD) τότε ισχύει

$a_{kk} < \sum_{j=1}^{k-1} \ell_{kj}^2$ για κάποιο k

οπότε τότε ο αλγόριθμος Cholesky αποτυγχάνει

Επίλυση τριγωνικών συστημάτων

Το σύστημα $LU\underline{x} = \underline{b}$ κατά την παραγοντοποίηση (ή $LU\underline{x} = P\underline{b}$ με εφαρμογή μερικής οδήγησης ή εναλλαγής γραμμών) ανάγεται στην επίλυση των τριγωνικών συστημάτων:

$L\underline{y} = \underline{b}$ (ή $L\underline{y} = P\underline{b}$) και

$U\underline{x} = \underline{y}$ ($\underline{x}$: τελική λύση)

Κάτω τριγωνικό σύστημα $L\underline{y}=\underline{b}$:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{for } k=1,\dots,n \\ \quad \text{for } j=1,\dots,k-1 \\ \qquad b_k = b_k - \ell_{kj}\, y_j \\ \quad y_k = b_k/\ell_{kk} \end{array}}$$

(εμπρόσθια αντικατάσταση ή forward substitution)

* Στο διάνυσμα δεξιού μέλους $\underline{b}$ πρέπει να έχουν εφαρμοστεί οι μεταθέσεις γραμμών $P\underline{b}$ που έχουν προκύψει από την παραγοντοποίηση LU (δεν χρειάζεται αν ο πίνακας είναι SPD και έχει γίνει παραγοντοποίηση Cholesky)

Άνω τριγωνικό σύστημα $U\underline{x}=\underline{y}$:

λύση του κάτω τριγ. συστήματος που προέκυψε από την forward substitution

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{for } k=n,\dots,1 \\ \quad \text{for } j=k+1,\dots,n \\ \qquad y_k = y_k - u_{kj}\, x_j \\ \quad x_k = y_k/u_{kk} \end{array}}$$

(οπισθία αντ/ση ή back-substitution)

- Πίνακας A, δεξί μέλος $\underline{b}$, και διάσταση n σε αρχείο .txt
- Ανάθεση μνήμης (malloc) για αποθήκευση των A, $\underline{b}$ και της τελικής λύσης $\underline{x}$
- Κλήση ρουτινών GSL για παραγοντοποίηση LU (για γενικό πίνακα) ή Cholesky (για SPD πίνακα)
- Κλήση ρουτινών GSL για επίλυση κάτω και άνω τριγωνικών συστημάτων.

* Η ρουτίνα GSL που εκτελεί παραγοντοποίηση LU (όχι Cholesky) επιστρέφει και διάνυσμα μεταθέσεων γραμμών $\underline{p}$, το οποίο πρέπει να αποθηκευτεί και να εφαρμοστεί στο διάνυσμα δεξιού μέλους $\underline{b}$, πριν τη λύση του κάτω τριγ. συστήματος ($L\underline{y}=P\underline{b}$) (επίσης χώρος στη μνήμη για το προσωρινό διάνυσμα $\underline{y}$)