Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Video na Youtube

1. Thomasův algoritmus
2. Schurův doplněk
3. Shrnutí

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

- mějme následující soustavu se silně regulární maticí

$$
\begin{pmatrix}
a_1 & b_1 & & & & \\
c_2 & a_2 & b_2 & & & \\
 & c_3 & a_3 & b_3 & & \\
 & & \ddots & \ddots & \ddots & \\
 & & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\
 & & & & c_n & a_n
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix}
x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n
\end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n
\end{pmatrix}
$$

- matici tohoto tvaru říkáme tridiagonální
- soustavy tohoto tvaru lze řešit velmi efektivně

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

- přímý chod by eliminoval prvky pod diagonálou a změnil pravou stranu:

$$\begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & & & & \\ & 1 & \mu_2 & & & \\ & & 1 & \mu_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & \mu_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \vdots \\ \rho_{n-1} \\ \rho_n \end{pmatrix}$$

- chceme tedy najít vztahy pro výpočet koeficientů μ_i pro $i \in \widehat{n-1}$ a ρ_i pro $i \in \hat{n}$

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

- z první rovnice snadno vidíme, že

$$\mu_1 = \frac{b_1}{a_1}, \quad \rho_1 = \frac{d_1}{a_1}$$

- soustava přejde na tvar

$$\begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & & & & \\ c_2 & a_2 & b_2 & & & \\ & c_3 & a_3 & b_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & c_n & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

- nyní vidíme, že první řádek využijeme jen k eliminaci jednoho nenulového prvku před diagonálou na druhém řádku, to je výrazně méně práce než u obecné GEM
- odečteme c_2 násobek prvního řádku od druhého

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

- dostáváme

$$\begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & & & & \\ & a_2 - c_2\mu_1 & b_2 & & & \\ & c_3 & a_3 & b_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & c_n & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ d_2 - c_2\rho_1 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

- následně podělíme druhý řádek pivotem

$$a_2 - c_2\mu_1$$

- dostáváme

$$\begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & & & & \\ & 1 & \frac{b_2}{a_2 - c_2\mu_1} & & & \\ & c_3 & a_3 & b_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & c_n & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \frac{d_2 - c_2\rho_1}{a_2 - c_2\mu_1} \\ d_3 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

- a tedy $\mu_2 = \frac{b_2}{a_2 - c_2\mu_1}$, $\rho_2 = \frac{d_2 - c_2\rho_1}{a_2 - c_2\mu_1}$

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

- v k-tém kroku máme na začátku soustavu tvaru

$$\begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & \\ & & 1 & \mu_{k-1} & & & \\ & & c_k & a_k & b_k & & \\ & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & c_n & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{k-1} \\ x_k \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_{k-1} \\ d_k \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

- odečteme c_k násobek $k-1$-tého řádku od k-tého

$$\begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & & & & & & \\ & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & 1 & \mu_{k-1} & & & & \\ & & & a_k - c_k\mu_{k-1} & b_k & & & \\ & & & c_{k+1} & a_{k+1} & b_{k+1} & & \\ & & & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & & & c_{n-1} & a_{n-1} & b_{n-1} \\ & & & & & & c_n & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{k-1} \\ x_k \\ x_{k+1} \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \vdots \\ \rho_{k-1} \\ d_k - c_k\rho_{k-1} \\ d_{k+1} \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{pmatrix}$$

- nyní podělíme k-tý řádek pivotem $a_k - c_k\mu_{k-1}$ a dostáváme

$$\mu_k = \frac{b_k}{a_k - c_k\mu_{k-1}}, \quad \rho_k = \frac{d_k - c_k\rho_{k-1}}{a_k - c_k\mu_{k-1}}$$

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

- z tvaru matice soustavy na konci přímého chodu, tj.

$$\begin{pmatrix} 1 & \mu_1 & & & & \\ & 1 & \mu_2 & & & \\ & & 1 & \mu_3 & & \\ & & & \ddots & \ddots & \\ & & & & 1 & \mu_{n-1} \\ & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \vdots \\ \rho_{n-1} \\ \rho_n \end{pmatrix}$$

snadno odvodíme vztahy pro zpětný chod

$$\begin{aligned} x_n &= \rho_n \\ x_{n-1} &= \rho_{n-1} - \mu_{n-1} x_n \\ &\vdots \\ x_k &= \rho_k - \mu_k x_{k+1} \\ &\vdots \\ x_1 &= \rho_1 - \mu_1 x_2 \end{aligned}$$

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

Metoda faktorizace pro tridiagonální soustavy

- $\mu_1 = \frac{b_1}{a_1}$, $\rho_1 = \frac{d_1}{a_1}$
- pro $k = 2, \ldots n-1$ napočítáme

$$\mu_k = \frac{b_k}{a_k - c_k \mu_{k-1}}, \quad \rho_k = \frac{d_k - c_k \rho_{k-1}}{a_k - c_k \mu_{k-1}},$$

- a $\rho_n = \frac{d_n - c_n \rho_{n-1}}{a_n - c_n \mu_{n-1}}$
- položíme $x_n = \rho_n$
- pro $k = n-1, \ldots, 1$ napočítáme

$$x_k = \rho_k - \mu_k x_{k+1}$$

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

Kód Thomasova algoritmu:

```
/****
 * Eliminuj prvky pod diagonalou
 */
A[ 0 ][ 1 ] /= A[( 0 ][ 0 ];
b[ 0 ] /= A[ 0 ][ 0 ];
A[ 0 ][ 0 ] = 1.0;
for( int k = 1; k < n; k++ )
{
  b[ k ] = ( b[ k ] - A[ k ][ k-1 ] * b[ k-1 ] ) /
         ( A[ k ][ k ] - A[ k ][ k-1 ] * A[( k-1 ][ k ] );
   if( k < n-1 )
   {
      A[ k ][ k+1 ] = A[ k ][ k+1 ] /
           ( A[( k ][ k ] - A[ k ][ k-1 ] * A[ k-1 ][ k ] ) );
      A[ k ][ k ] = 1.0;
   }
}

/****
 * Zpetna substituce
 */
for( int k = n - 2; k >= 0; k-- )
  b[ k ] = b[ k ] - A[ k ][ k+1 ] * b[ k + 1 ];
```

Modifikace GEM pro tridiagonální systém

- Thomasův algoritmus je implementován v programu `thomas-solver`
  - `--size n`
    - velikost matice soustavy
    - její tvar je

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 2.5 & -1 & & \\ -1 & 2.5 & -1 & \\ & -1 & 2.5 & -1 \\ & & -1 & 2.5 \end{pmatrix}$$

    - pravá strana se napočítá tak, aby řešením byl vektor ze samých jedniček
    - program řeší zadanou soustavu nejprve pomocí GEMu a pak pomocí Thomasova algoritmu pro porovnání efektivity obou řešičů
  - `--verbose n`
    - nastavuje úroveň vypisovaných informací v průběhu výpočtu

Schurův doplněk

- mějme soustavu $\mathbb{A}\vec{x} = \vec{b}$ se silně regulární maticí $\mathbb{A}$ s následující blokovou strukturou

$$\begin{pmatrix} \mathbb{A}_1 & & & & \mathbb{C}_1 \\ & \mathbb{A}_2 & & & \mathbb{C}_2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \mathbb{A}_{r-1} & \mathbb{C}_{r-1} \\ \mathbb{B}_1 & \mathbb{B}_2 & \dots & \mathbb{B}_{r-1} & \mathbb{A}_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \\ \vdots \\ \vec{x}_{r-1} \\ \vec{x}_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{d}_1 \\ \vec{d}_2 \\ \vdots \\ \vec{d}_{r-1} \\ \vec{d}_r \end{pmatrix}$$

- rozměry bloků mohou být různé, ale požadujeme, aby $\mathbb{A}_i$, $\mathbb{C}_i$, $\vec{x}_i$ a $\vec{d}_i$ měly stejný počet řádků pro $i \in r \hat{-} 1$, aby $\mathbb{B}_1, \mathbb{B}_1, \dots \mathbb{B}_{r-1}, \mathbb{A}_r, \vec{x}_r$ $\vec{d}_r$ měly stejný počet řádků, aby $\mathbb{A}_i$ a $\mathbb{B}_i$ měly stejný počet sloupců pro $i \in r \hat{-} 1$, a aby $\mathbb{C}_1, \dots \mathbb{C}_{r-1}$ a $\mathbb{A}_r$ měly stejný počet sloupců

Schurův doplněk

- provedeme blokovou Gaussovu eliminaci, tj. i-tý řádek vynásobíme maticí $\mathbb{A}_i^{-1}$ pro $i \in r \hat{-} 1$

$$\begin{pmatrix} \mathbb{I} & & & & \mathbb{A}_1^{-1}\mathbb{C}_1 \\ & \mathbb{I} & & & \mathbb{A}_2^{-1}\mathbb{C}_2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \mathbb{I} & \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\mathbb{C}_{r-1} \\ \mathbb{B}_1 & \mathbb{B}_2 & \dots & \mathbb{B}_{r-1} & \mathbb{A}_r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \\ \vdots \\ \vec{x}_{r-1} \\ \vec{x}_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{A}_1^{-1}\vec{d}_1 \\ \mathbb{A}_2^{-1}\vec{d}_2 \\ \vdots \\ \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\vec{d}_{r-1} \\ \vec{d}_r \end{pmatrix}$$

- od posledního řádku postupně odečteme $\mathbb{B}_i$ násobek i-tého řádku

$$\begin{pmatrix} \mathbb{I} & & & & \mathbb{A}_1^{-1}\mathbb{C}_1 \\ & \mathbb{I} & & & \mathbb{A}_2^{-1}\mathbb{C}_2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \mathbb{I} & \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\mathbb{C}_{r-1} \\ & & & & \mathbb{A}_r - \mathbb{B}_1\mathbb{A}_1^{-1}\mathbb{C}_1 - \mathbb{B}_2\mathbb{A}_2^{-1}\mathbb{C}_2 - \dots - \mathbb{B}_{r-1}\mathbb{A}_{r-1}^{-1}\mathbb{C}_{r-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \\ \vdots \\ \vec{x}_{r-1} \\ \vec{x}_r \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} \mathbb{A}_1^{-1}\vec{d}_1 \\ \mathbb{A}_2^{-1}\vec{d}_2 \\ \vdots \\ \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\vec{d}_{r-1} \\ \vec{d}_r - \mathbb{B}_1\mathbb{A}_1^{-1}\vec{d}_1 - \mathbb{B}_2\mathbb{A}_2^{-1}\vec{d}_2 - \dots - \mathbb{B}_{r-1}\mathbb{A}_{r-1}^{-1}\vec{d}_{r-1} \end{pmatrix}$$

Schurův doplněk

Definition 1

Matice
$\mathbb{S} = \mathbb{A}_r - \mathbb{B}_1\mathbb{A}_1^{-1}\mathbb{C}_1 - \mathbb{B}_2\mathbb{A}_2^{-1}\mathbb{C}_2 - \ldots - \mathbb{B}_{r-1}\mathbb{A}_{r-1}^{-1}\mathbb{C}_{r-1}$ se nazývá Schurův doplněk.

- matici jsem převedli na blokově horní trojúhelníkovou
- zavedeme značení
  $\vec{s} = \vec{d}_r - \mathbb{B}_1\mathbb{A}_1^{-1}\vec{d}_1 - \mathbb{B}_2\mathbb{A}_2^{-1}\vec{d}_2 - \ldots - \mathbb{B}_{r-1}\mathbb{A}_{r-1}^{-1}\vec{d}_{r-1}$
- pak má soustava tvar

$$\begin{pmatrix} \mathbb{I} & & & & \mathbb{A}_1^{-1}\mathbb{C}_1 \\ & \mathbb{I} & & & \mathbb{A}_2^{-1}\mathbb{C}_2 \\ & & \ddots & & \vdots \\ & & & \mathbb{I} & \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\mathbb{C}_{r-1} \\ & & & & \mathbb{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \\ \vdots \\ \vec{x}_{r-1} \\ \vec{x}_r \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbb{A}_1^{-1}\vec{d}_1 \\ \mathbb{A}_2^{-1}\vec{d}_2 \\ \vdots \\ \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\vec{d}_{r-1} \\ \vec{s} \end{pmatrix}$$

- snadno vidíme, že řešení lze získat jako

$$\begin{aligned} \vec{x}_r &= \mathbb{S}^{-1}\vec{s} \\ \vec{x}_{r-1} &= \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\vec{d}_{r-1} - \mathbb{A}_{r-1}^{-1}\mathbb{C}_{r-1}\vec{x}_r \\ &\vdots \\ \vec{x}_1 &= \mathbb{A}_1^{-1}\vec{d}_1 - \mathbb{A}_1^{-1}\mathbb{C}_1\vec{x}_r \end{aligned}$$

Schurův doplněk

Výpočet probíhá takto:

- nejprve napočítáme inverze $\mathbb{A}_i^{-1}$ pro $i \in r \hat{-} 1$, v případě paralelního výpočtu to lze provést současně
- napočítá se Schurův doplněk $\mathbb{S}$
- vyřeší se soustava $\mathbb{S}\vec{x}_r = \vec{s}$
- napočítají se zbylé složky řešení $\vec{x}_{r-1}, \ldots, \vec{x}_1$, to lze také provést paralelně

Schurův doplněk

- na Schurově doplňku jsou postaveny některé metody pro paralelní řešení lineárních soustav, to je dáno blokovým tvarem matice
  - pro soustavy pocházející z řešení parciálních diferenciálních rovnic je to metoda zvaná *domain decomposition*
- teoreticky můžeme uvažovat, že bloky mají velikost 1, a jde zase jen o speciální tvar matice podobně, jako u tridiagonální matice
- takové matice se ale neobjevují často na rozdíl od tridiagonálních matic
- Schurův doplněk má ale i jiný význam než jen pro paralelizaci

Schurův doplněk

- pro $r = 2$ nemusí být původní soustava ani řídká
- dostáváme

$$\begin{pmatrix} \mathbb{A}_1 & \mathbb{C}_1 \\ \mathbb{B}_1 & \mathbb{A}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{d}_1 \\ \vec{d}_2 \end{pmatrix}$$

- pokud je $\mathbb{A}_1$ např. tridiagonální nebo symetrická nebo pozitivně definitní můžeme k výpočtu její inverze využít efektivnější metody, které už známe
- tento postup se velice často používá pro soustavy, které jsou indefinitní, tj. mají kladná i záporná vlastní čísla – běžné metody zde nejsou příliš efektivní

Schurův doplněk

- také jsme si na Schurově doplňku ukázali, jak provádět GEM na blokové matice
- podobný postup lze použít i pro blokově tridiagonální matice nebo jiné blokově výhodně uspořádání matice

Shrnutí

- řešení soustav s tridiagonální maticí
- co je to Schurův doplněk
- blokové modifikace maticových algoritmů