nvkurbatova@sfedu.ru

Пакеты научных вычислений

Лекция 5.

Класс разреженых матриц – Sparse. Эффективные решения СЛАУ, нелинейных систем и уравнений. Баловство.

Курбатова Наталья Викторовна, к.ф.-м.н.,
доцент кафедры математического моделирования, мехмат, ЮФУ

Содержание

Sparse

- Конструктор разреженных матриц. Связь с полной.
- Факторизация полных и разреженных матриц.
- Решение СЛАУ полных и разреженных систем.
- Оценка скорости решения алгоритмов.

Нелинейные системы (НС)

- Класс Symbol
- НС второго порядка. Прикладные задачи.
- Нелинейные системы высоких порядков. Методы решения в ML. Метод Ньютона.

nvkurbatova@sfedu.ru

Класс разреженных матриц. Sparse

Предпосылки создания Sparse:

1) Операции умножения затратны – да ещё и на ноль!
2) если **nnz(A)<n*m/2**; [n,m] =size(A) → переходим в **sparse**
3) В результате дискретизации краевых задач получаются, в т.ч. симметричные, трехдиагональные, ленточные и существенно неполные матрицы систем (для разнородных сред – **ой, что это?**)
4) ∃ эффективные алгоритмы факторизации систем, ориентированные на векторные, профильные формы хранения матриц (систем).
5) Возможность распараллеливания операций в ML в сочетании со **sparse** делает быстрыми алгоритмы для больших систем.
6) Функции идентификация ненулевых элементов матрицы и конвертирования «структуры» в **sparse** уже существовали:

   [i, j, v] = find(A); элемент A**(**i(**1**), (j(1)**)** становится элементом v(1)

   s=spconvert([i, j, v]), s∈Sparse <-> A~full(s)

nvkurbatova@sfedu.ru

Свойства и конструкторы объектов Sparse

s = sparse(A) – конструктор разреженной матрицы, A – полная

A = full(s) – конвертирование матрицы в полную

issparse(s), isfull(A) – контроль типов

S = spones(s) конструкторы sp-матриц из единиц в позициях ненулевых элементов матрицы **s**

S=speye(size) – конструктор единичной sp-матрицы

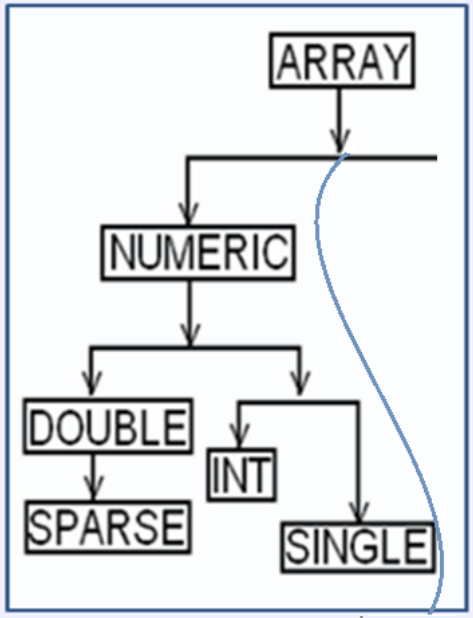
spdiags (аналог **diag**) извлекает диагональ или создаёт sp-диагональную

sprandn(size,density), sprand(size,density) – генераторы sp-матриц нормально и равномерно распределенных с заданной плотностью ненулевых элементов

S = spalloc(m,n,nz) – выделяется память разреженной матрице **S** с числом ненулевых элементов, не превышающем **nz**

If D is a sparse matrix, then spconvert returns D!

Sparse матрицы наследуют методы классов Array, Numeric, Double (в т.ч. операции арифметические, логические, отношения, матричной алгебры и т.д.)



nvkurbatova@sfedu.ru

Конструктор **sprandsym** – *факультативно!*

- **R = sprandsym(S)** генерирует симметричную матрицу, той же структуры, что **S**
- **R = sprandsym(n,density)** , R - n×n, симметричная, **density** - плотность разреженности, density*n*n, density∈(0,1)
- **R = sprandsym(n,density,rc,kind)** - генерируется положительно определенная **(ПО) R**

  rc – число обусловленности (rc=norm(X,p) * norm(inv(X),p)), чем ближе к **единиице**, тем устойчивее система (решение)

  If **kind = 1**, **R** генерируется **(ПО)** матрица диагональной структуры.

  If **kind = 2**, для продвинутых программистов проблемного программирования

  If **kind = 3**, создаётся структура, соответствующая входной матрице (вместо **n**)

Пример для отладчика: (почувствуем себя отладчиком!):

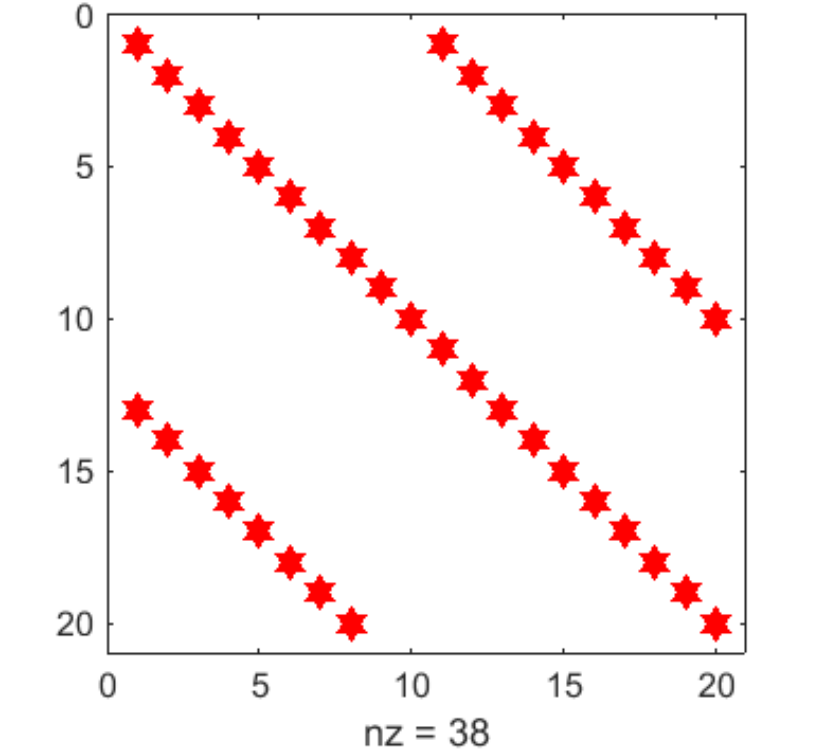
```
1) clear ; vu=rand(1,5); d=randn(1,6); vl=randn(1,5)+4;
2) S=diag(d)+diag(vu,1)+diag(vl,-1)
3) R = sprandsym(S,[],0.9,3)
4) spy(R); eig(R)
5) R==R'
```

nvkurbatova@sfedu.ru

Преобразуем матрицу в Sparse?

Пример создания разреженной матрицы:

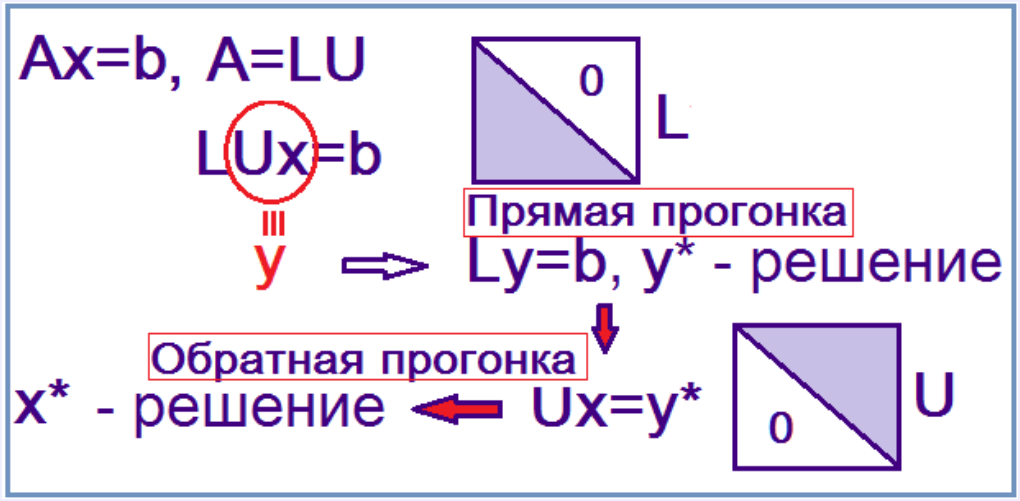
```
1)  b=randi([1,16],1,10);
2)  c=randi([1,16],1,20);
3)  l=randi([1,16],1,8);
4)  A=diag(c)...
5)    +diag(b,10)+diag(l,-12);
6)  nonzero=nnz(A)
7)  spy(A,'hr',12);
8)  set(get(gca,'children'),...
9)     'MarkerFaceColor','r');
10) [i, j, v] = find(A) ;
11) NumbersRow=feval('length',[i, j, v])
12) NumbersRow1=length([i, j, v]) % аналогично
13) sA=sparse(A) % конвертировали в Sparse
14) length(sA) %  равно количеству строк sA~nnz!
15) B=A+diag(diag(A))
16) TrueFalse=all(all(A==B) )%  Result ???
```



nvkurbatova@sfedu.ru

Мотивация факторизации матриц

Матрица системы – произведение нижне - и верхнетреугольной матриц:

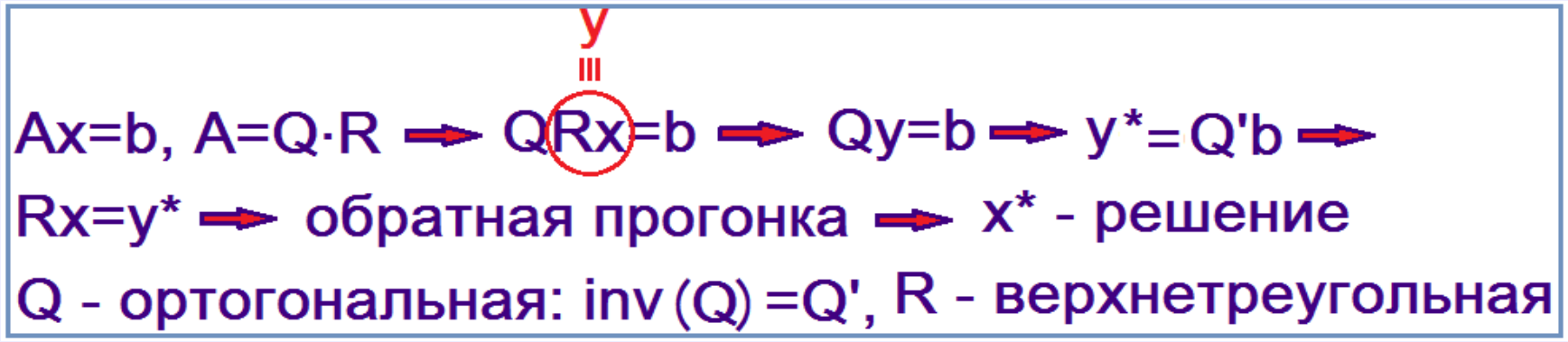


Факторизованные системы легко решать:

a)Треугольные →готово решение!

b) ортогональные легко обращать!

Матрица системы – произведение ортогональной и верхнетреугольной матриц:



Факторизация матриц и решение систем

```
n = 6;
ipr='sp' % ipr='sp' или ipr=1
%Положительно-определенные здесь:
N = 50;
A = gallery('poisson', N);
A = pascal(6); M=A
%
if ipr=='sp', M=sparse(A), end
R = chol(M)
spy(R)
isequ
[Q,R]
det(Q
```

```
R: 6x6 double =
    (1,1)        1
    (1,2)        1
    (2,2)        1
    (1,3)        1
     ...
```

В *относительно* ранних версиях функции факторизации разреженных матриц отличались наличием sp* в имени, теперь нет !

Функции, что и для полных матриц!

Факторизация полных и разреженных матриц:

	Описание
[L,U]=lu(M)	**M=L·U, L**-нижнетреугольная матрица, **U**-верхнетреугольная.
[Q,R]=qr(M)	**M=Q·R, R**-верхнетреугольная матрица, **Q**-ортогональная: inv(**Q**)=**Q'**,**Q·Q'**=eye(size(**Q**))
R=chol(M)	**R**-верхнетреугольная матрица, **M=R'·R, M** – положительно определённая **isequal(R'·R,M) %true!**

isequal(A,B,C)

true – полном совпадении матриц A,B,C

Универсальный решатель

linsolve(A,B,opts)

A,B – матрица и столбец свободных членов, соответственно

opts.UT – true; opts.LT – true; (треугольные матрицы L or U)

opts.SYM – true; (матрица системы – симметричная)

opts.POSDEF – true; (матрица системы – положительно определеннаяи заведомо симметричная)

Чем хороша положительно определенная матрица?

Заметим, что все опции должны быть определены до решения СЛАУ с помощью linsolve(A,B,opts)

Оценка быстродействия алгоритмов

Функции оценки быстродействия:

1) **tic** *operators* **toc** 2) **clock** operators **etime**

3) **cputime**

Пример:

```
clear,   x = rand(900000, 1);

%%  the first approach - stopwatch:
%(preferably! Opinion exists))
% fft – Fast Fourier transform (of signal)
tstart = tic;  fft(x);  toc(tstart) % 0.043874 seconds

%% the second approach - clock:
t1 = clock;  fft(x);  etime(clock, t1) % ans=clock-t1= 0.023

%% the third approach - cputime:
tstart=cputime; fft(x); cputime-tstart % 0.0625 seconds
```

clock :1.0e+03 *[2.0230 0.0030 0.0090 0.0220 0.0500 0.0437]

год 2023 месяц 3 число 9 час 22 минута 50 секунда 43 **(7) ???**

Класс Symbol и методы поддерживаемые в ML

```
>> methods(sym)
```

Методы для класса SYM:

abs	*ezpolar*	*nnz*
acos	*ezsurf*	*nonzeros*
acosh	*ezsurfc*	*norm*
acot	*factor*	*not*
acoth	*factorial*	*null*

...

Декларирование

символьных переменных:

```
syms  var1 var2 var3 % и т.д.
```

Конвертирование Char в SYM

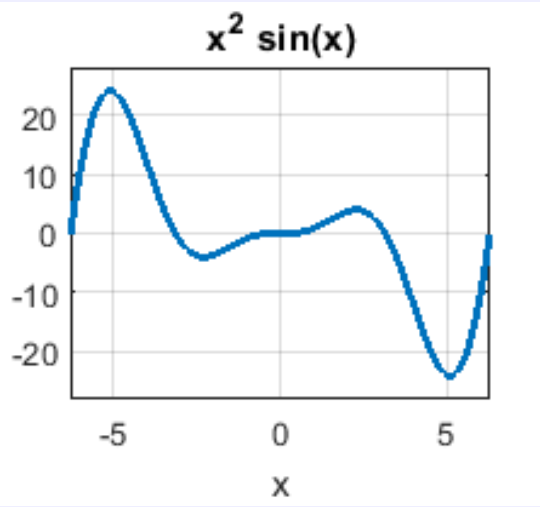
```
x=sym ('x')  % переменной
y=sym  (expressionChar)
```

Пример

```
syms a x  y % разделяются пробелами!!!
y = sin(x) * x^2, t=ezplot(y)
set(t,'linewidth',2), grid on
a = expand(sym('(x+1)^2*(2*x+3)'))
% sym(Char) – возможно, устареет
```

```
a =

2*x^3 + 7*x^2 + 8*x + 3
```



Подходы к решению нелинейных уравнений и систем

1. Графическая визуализация уравнений (системы);
2. Выбор нулевых приближений и решение с помощью $fsolve$;
3. Выбор нулевых приближений интерактивно, используя $ginput$;
4. Решение уравнения вместо системы $fzero$;
5. Нахождение корней полиномов $roots$.

F(x)=0 и интерактивный выбор нулевого приближения или диапазона:

[pointsX,pointsY]=ginput(n),

pointsX - вектор абсцисс n- точек, pointsY –вектор ординат точек-нулевых приближений, в которых щёлкните мышкой

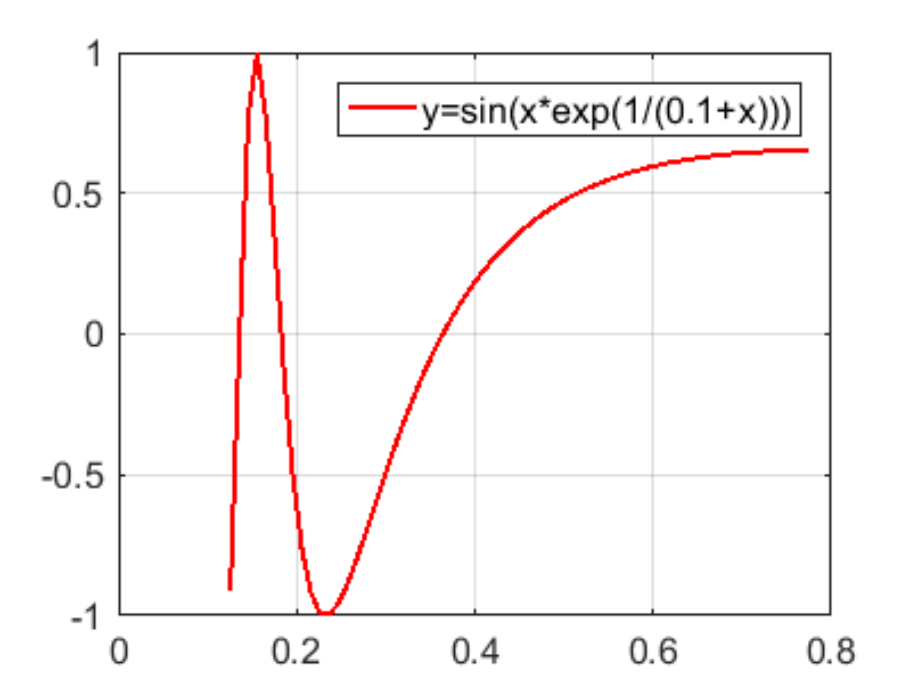
```
Clear % F(x)=sin(x*exp(1/(0.1+x)))
set(0,'DefaultAxesFontSize',12,...
 'DefaultAxesFontName','Arial');
x=pi/25:0.01:pi/4;
y='sin(x.*exp(1./(0.1+x)))'
 plot(x,eval(y),'r-','linewidth',1.5)
 lg=legend('y=sin(x*exp(1/(0.1+x)))')
 set(lg,'fontsize',12), grid on,
[x0,y0]=ginput(3) % ждёт три нул.прибл.
sol=fsolve('sin(x.*exp(1./(0.1+x)))',x0)
```

---

x0 =	y0 =	sol =
0.1266	-0.2041	0.1359
0.1798	-0.1983	0.1826
0.3234	-0.2041	0.3639

Решение F(x) = 0

[sol,accuracy,exitSol,InDetail]=fsolve(F,x0,opts)



Решение нелинейной системы второго порядка ($F_1(x)=0$, $F_2(x)=0$)

1) Решение системы – точки пересечения кривых $F_1(x)=0$ и $F_2(x)=0$:

```
fplot(@(x) sin(8*x).*x',[-1,1],'linewidth',2), hold on .
fplot(@(x) x.^5-x+0.5',[-1,1],'linewidth',2)
x0=[-0.9 0.2 0.8]              % visually
```

2) Сначала ищем (абсциссы)корни $F_1(x)-F_2(x)=0$

```
x=fsolve('x.*sin(8*x)-(x.^5-x+0.5)',x0)
```

3) Ищем значения ординат точек пересечения:

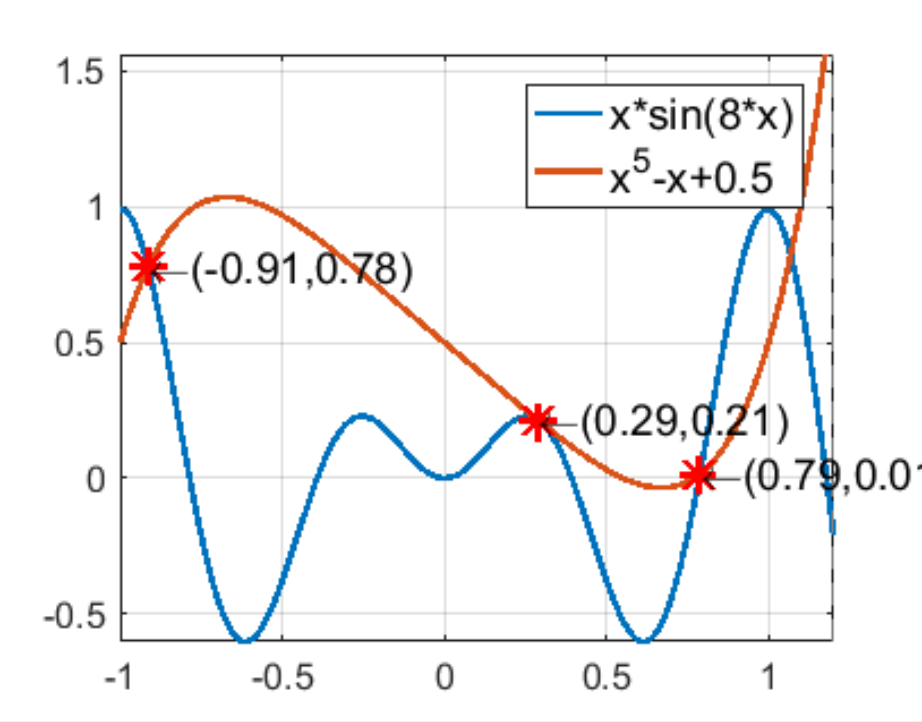
```
y=eval('x.*sin(8*x)')
plot(x,y,'r*','linewidth',2)
```

4) Формируем надписи:

```
for i=1:length(x)
   xy{i}=['(',num2str(x(i),2),',',num2str(y(i),2),')']
   text(x(i),y(i),['\leftarrow' xy{i}])
end
```

Почему выполняем шаг 2)?

Сколько строк конкатенирует на шаге 4)?



Корни полиномов . FZERO и ROOTS

!!! Рассмотрите самостоятельно функцию **fminbnd** – поиск минимального значения на отрезке

sol=fzero(@(x) express, x0)
sol=fzero(Fun, x0)

```
clear
%% fzero
x1=fzero(@(x) x^5+x^2-10*x-4.5,1.5)
x2=fzero(@(x) x^5+x^2-10*x-4.5,0.5)
x3=fzero(@(x) x^5+x^2-10*x-4.5,2)
      err=x1^5+x1^2-10*x1-4.5
%% roots
p=[1 0 0 1 -10 -4.5]
allroots=roots(p)
polyval(p,allroots(4))
```

```
err = 0
```

```
allroots =

  -1.9432 + 0.0000i
  -0.0327 + 1.7827i
  -0.0327 - 1.7827i
   1.5336 + 0.0000i
   0.4750 + 0.0000i

ans =

  -6.2172e-15
```

allroots=roots(p) – вычисляются корни полинома

polyval(p,value) - вычисляется значение полинома в точке value

p-вектор коэффициентов полинома

Точность вычисления фунций:

roots – точность высокая default

fzero – точность высокая default

Решение систем нелинейных алгебраических уравнений. Метод простых интераций (МПИ) для СНАУ

Система НАУ порядка n может быть представлена в общем виде:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \end{cases}$$

$f_1, f_2, \dots, f_n$ – в т.ч. нелинейные функции переменных $X \equiv x_1, x_2, \dots, x_n$.

Пусть $|f_i(X)|$ – невязки системы на векторе X, тогда

если X^* – решение системы, то $|f_i(X)| = 0,\ i = 1, 2, \dots, n.$

Процесс нахождения решения итеративный; строится k-е приближение, и оно является решением с заданной точностью ε, если

$$|f_i(X^k)| < \varepsilon,\ i = 1, 2, \dots, n.$$

Алгоритм метода простых интераций

1. Задаём точность ε (≤0.001, по фантазии)

2. Преобразуем систему к нормализованному виду:

$$X=\Phi(X), \text{ где } \Phi(X)=\begin{cases}\varphi_1(x_1, x_2, \dots, x_n)\\ \dots\\ \varphi_n(x_1, x_2, \dots, x_n)\end{cases}$$

$$\varphi_i = x_i + f_i, \qquad i = 1, 2, \dots, n.$$

Выбираем начальное приближение (геометрически) $X^{(0)} = \left(x_1^{(0)}, x_2^{(0)}, \dots, x_n^{(0)}\right)$

Если невозможно, то н.п. - нулевой вектор или случайный

3. Вводим k – счетчик итераций.

4. Определяем формулу итерационного процесса: $X^{(k+1)} = \Phi(X^{(k)})$

5. Вычисляем $(k+1)$ приближение, формула 4-го шага

6. Сравниваем $(k+1)$ приближение с предыдущим

$$\max_{1<i<n} \left|x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}\right| < \varepsilon$$

Если условие выполнено, то решение найдено, если нет, то вычисляем следующее приближение (шаг 5)

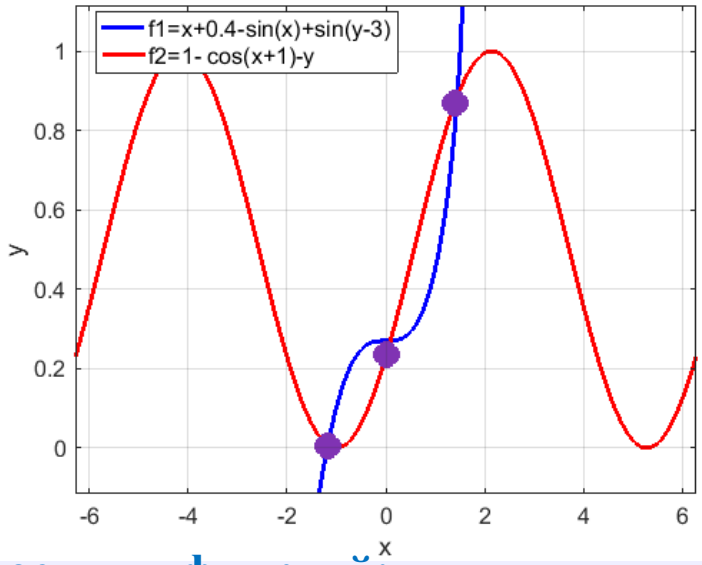
Пример решения СНАУ методом простых итераций

Пример:

$$\begin{cases} 2y + \cos(x+1) = 1 \\ \sin(x) - \sin(y-3) = 0.4 \end{cases}$$

нормализованная система:

$$\begin{cases} x = \varphi_1(x,y) = x + 0.4 - \sin(x) + \sin(y-3) \\ y = \varphi_2(x,y) = (1 - \cos(x+1))/2 \end{cases}$$



Программирование с использованием встроенных функций:

1. **Построить функции исходной системы графически.**
2. **Визуально определить нулевые приближения.**
3. **Задать точность решения ε**
4. **Ввести счетчик количества итераций (k=0 в начале)**
5. **Проверить, обеспечивают ли текущие решения заданную точность**
6. **Нет, точность не достигается – изменяем количество итераций и текущее значение используем как нулевое приближение, повторяем с шага 5**
7. **Да, точность достигается, празднуем победу!**

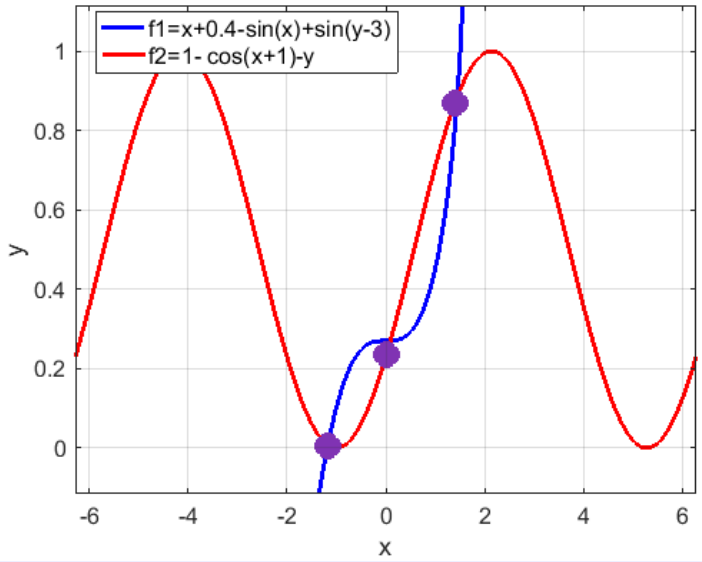
Пример решения СНАУ с помощью функционала MatLab

Пример:

$$\begin{cases} 2y + \cos(x+1) = 1 \\ \sin(x) - \sin(y-3) = 0.4 \end{cases}$$

нормализованная система:

$$\begin{cases} x = \varphi_1(x,y) = x + 0.4 - \sin(x) + \sin(y-3) \\ y = \varphi_2(x,y) = (1 - \cos(x+1))/2 \end{cases}$$



Программирование с использованием встроенных функций:

1. Построить функции исходной системы графически.

2. На шаге 1. используем ezplot, fplot, implicitplot

3. Для решения системы используем fplot (уравнеия системы задать как внешнюю функцию) с опцией регулирования ToleranceX: TolX, например, с точностью 10^{-3}:

```
optimset('TolX',1.0e-3)
```

4. Следует для наглядности отредактировать свойства осей

Пример решения **СНАУ** для систем высоких порядков

```
Clear        % high order nonlinean System
x0=[0.9 0.9 0.9]
Fun=@FunNL
   options.StepTolerance = 0.0001;
   options.Display = 'iter'
[X,FVAL,EXITFLAG,output,jacobian] = fsolve(Fun,x0,options)

FVAL     %1.0e-07 *[-0.0001   -0.1225    0.0101]
EXITFLAG % 1 - system solved
output   % iterations: 3
         % funcCount: 16
         % algorithm: 'trust-region-dogleg'
         % firstorderopt: 3.6043e-08
         % message: 'Equation solved....'
```

```
% подфункция (где расположена?)
function F=FunNL(x)
F(1)=3*x(1)+x(2)-x(3)-1;
F(2)=sqrt(x(1))-x(2)+pi*x(3)-pi;
F(3)=x(1)+x(2)+x(3)^2-3
end
```

Explaination: Trust-region методы стабильны, могут применяться в т.ч. для плохо обусловленных систем и имеют очень достойные характеристики сходимости!

В методе учитывается шаг при поиске корней и направление!!!

nvkurbatova@sfedu.ru

Бонус 1

Solve Sudoku Puzzles Via Integer Programming

Используется алгоритм целочисленного программирования

Начальный пазл:

Здесь |B| матрица исходных ключей (1:9). **Первая строка**|B(1,2,2)|, столбец – 2й значение ключа clues 2; столбец – 5й |B(1,5,3)|, значение ключа – 3 и т.д.

SudokuExample.m % Exampes ML

```
B =[1,2,2; 1,5,3; 1,8,4;...
    2,1,6; 2,9,3; 3,3,4; ...
    3,7,5; 4,4,8; 4,6,6;...
    5,1,8; 5,5,1; 5,9,6;...
    6,4,7; 6,6,5; 7,3,7;...
    7,7,6; 8,1,4; 8,9,8;...
    9,2,3; 9,5,4; 9,8,2];
drawSudoku(B)
set(get(gcf,'children'),'fontsize',100)
S = sudokuEngine(B); % решение
drawSudoku(S)
set(get(gcf,'children'),'fontsize',100)
```

B

	2			3			4	
6								3
		4				5		
			8		6			
8				1				6
			7		5			
		7				6		
4								8
	3			4			2	

S

9	2	5	6	3	1	8	4	7
6	1	8	5	7	4	2	9	3
3	7	4	9	8	2	5	6	1
7	4	9	8	2	6	1	3	5
8	5	2	4	1	3	9	7	6
1	6	3	7	9	5	4	8	2
2	8	7	3	5	9	6	1	4
4	9	1	2	6	7	3	5	8
5	3	6	1	4	8	7	2	9

Бонус 2 - Рекурсия

nvkurbatova@sfedu.ru

ПРИМЕРЫ РЕКУРСИЙ

- Сумма первых N натуральных чисел

S(N)=1+2+3+…+(N-1)+N

$$S(N)=\begin{cases}1, \text{если } N=1\\ S(N-1)+N, \text{если } N>1\end{cases}$$

- Степень с натуральным показателем

$X^n = X^{n-1}*X$

$$X^n=\begin{cases}X, \text{если } n=1\\ X^{n-1}*X, \text{если } N>1\end{cases}$$

- Факториал

$$N!=\begin{cases}1, & N=1\\ N\cdot(N-1)!, & N>1\end{cases}$$

File: mainRecur

```
function mainRecur
n=4
res=myRecur(n)

%% подфункция
function R=myRecur(m)
   if  m==1
      R=1
   else R=m*myRecur(m-1)
   end
end
end
```

Что запрограммировано?

nvkurbatova@sfedu.ru

Спасибо за внимание!

«Никто не обнимет необъятного!» - Козьма П. Прутков

(Л. М. Жемчужников, А. Е. Бейдеман, Л. Ф. Лагорио)

Напомните о Эжене Ажаре и Ромен Гари!