Od Pythagorovy věty k super-počítání

MODAM, 10. dubna 2015

Dalibor Lukáš

Kat. aplikované matematiky, FEI & IT4Innovations
VŠB–TU Ostrava

web: am.vsb.cz
email: dalibor.lukas@vsb.cz

IT4Innovations
národní
superpočítačové
centrum

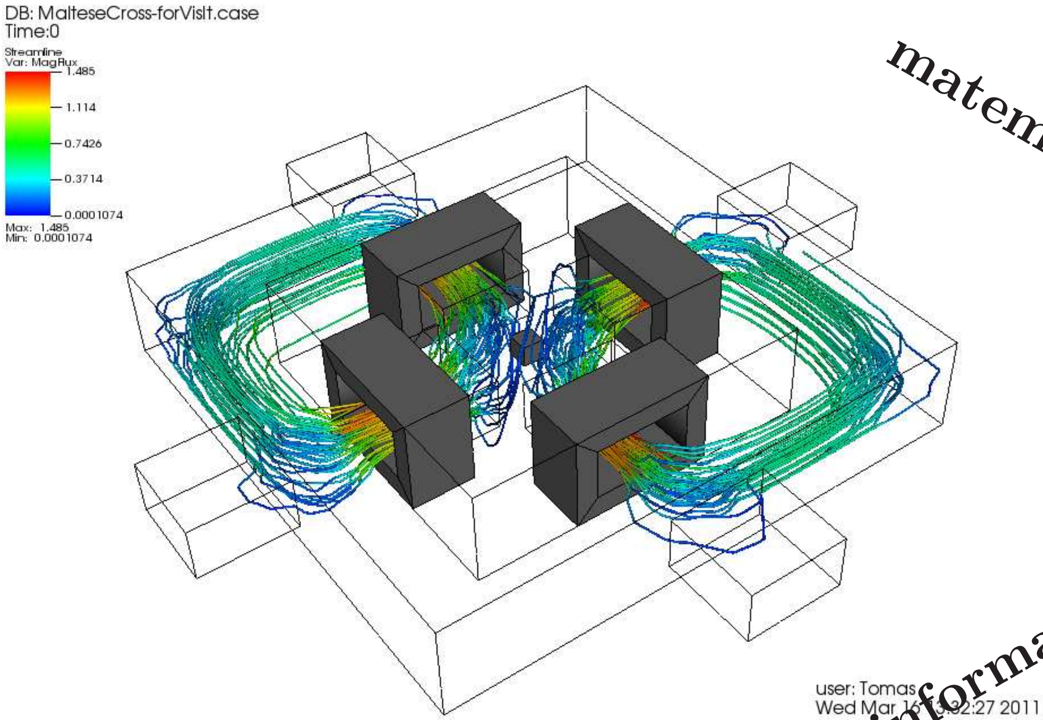
evropský sociální fond v ČR
EVROPSKÁ UNIE
MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ, MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY
OP Vzdělávání pro konkurenceschopnost
INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Od Pythagorovy věty k super-počítání

Matematika pro řešení náročných technických úloh

aplikace

matematika



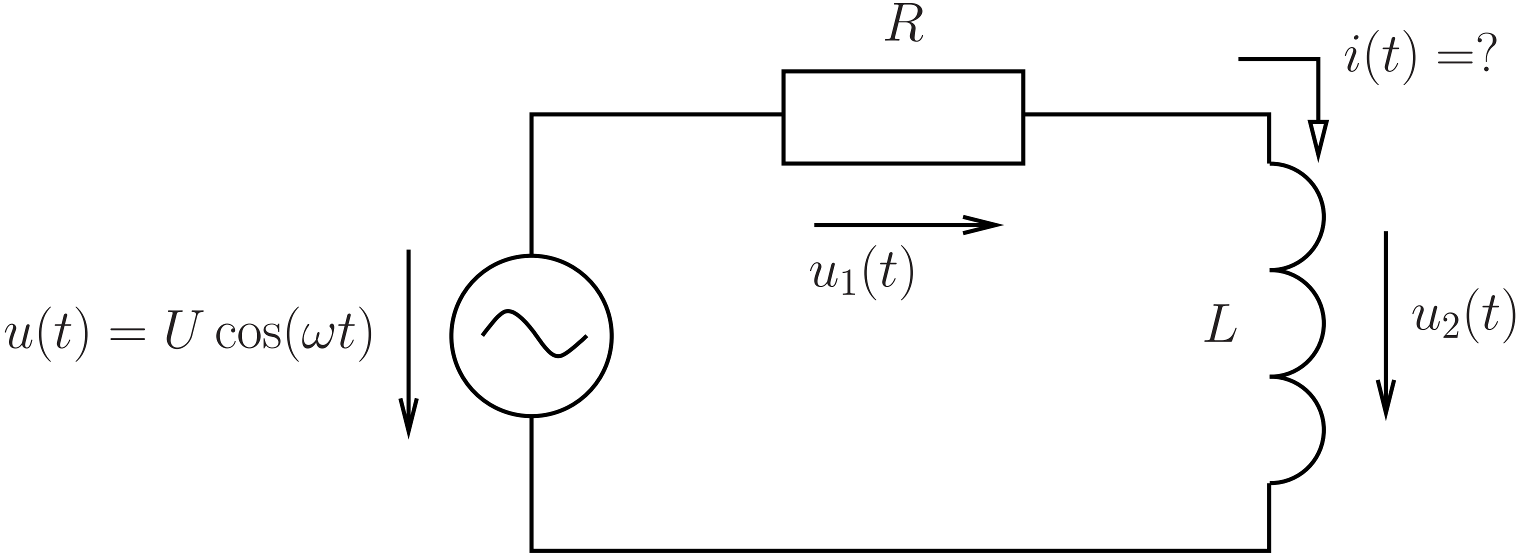
fyzika

informatika

Od Pythagorovy věty k super-počítání

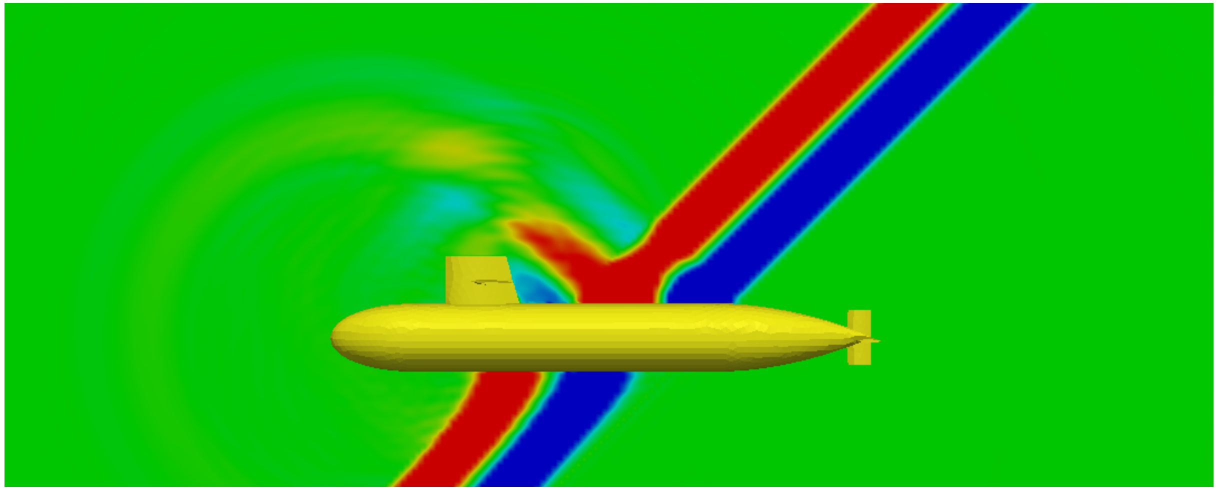
Soustavy lineárních rovnic: RL obvod — 1 rovnice/neznámá

$$(R + \imath\omega L)\widehat{I} = U \quad \rightsquigarrow \quad i(t) = \mathrm{Re}\left\{\widehat{I}(\cos(\omega t) + \imath\,\sin(\omega\,t)\right\}$$



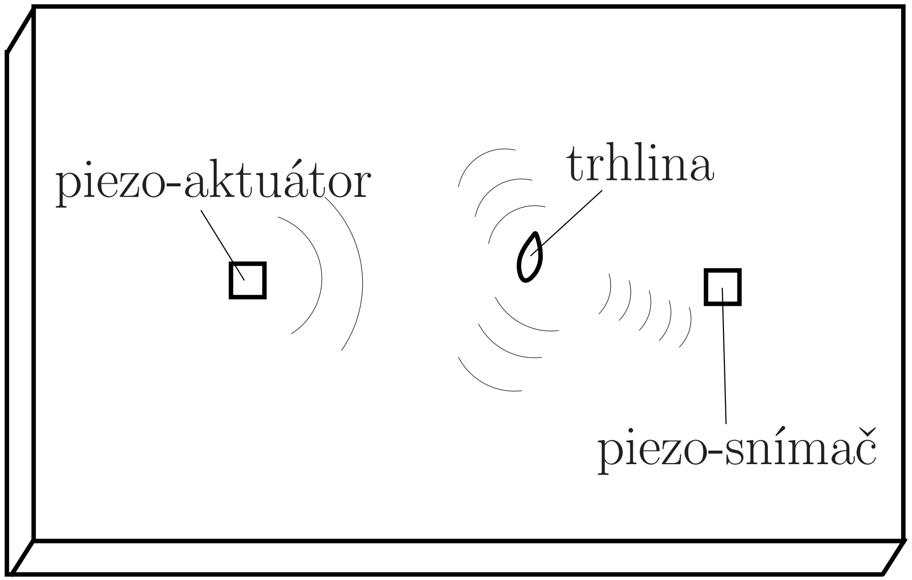
Od Pythagorovy věty k super-počítání

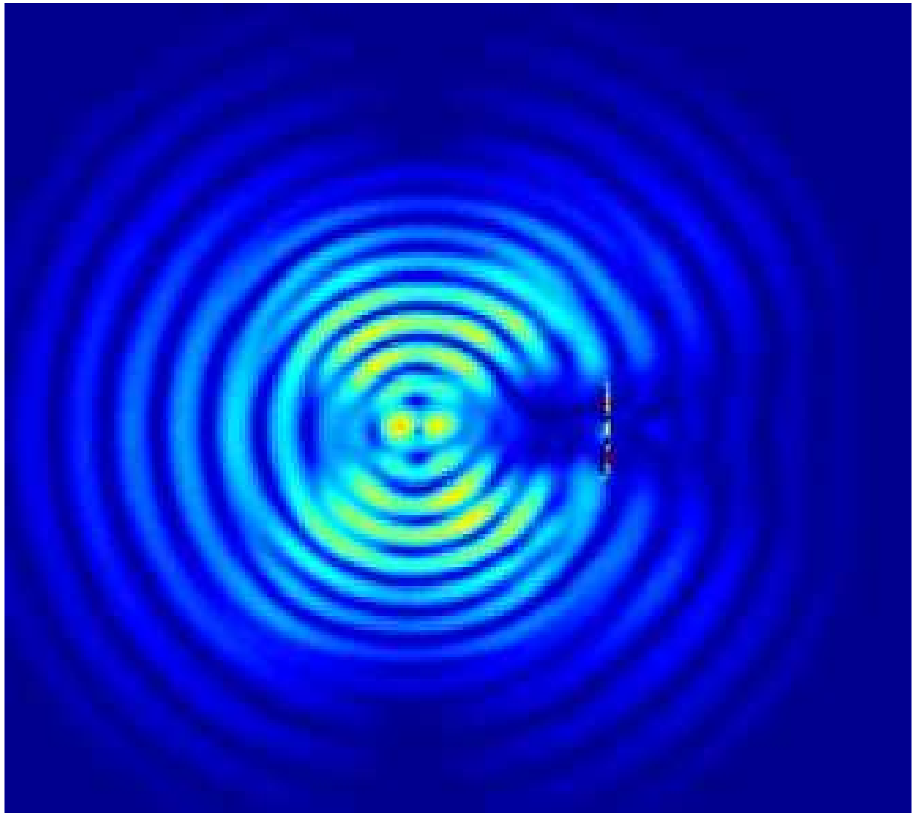
Soustavy lin. rovnic: ultrazvuková detekce ponorky



Od Pythagorovy věty k super-počítání

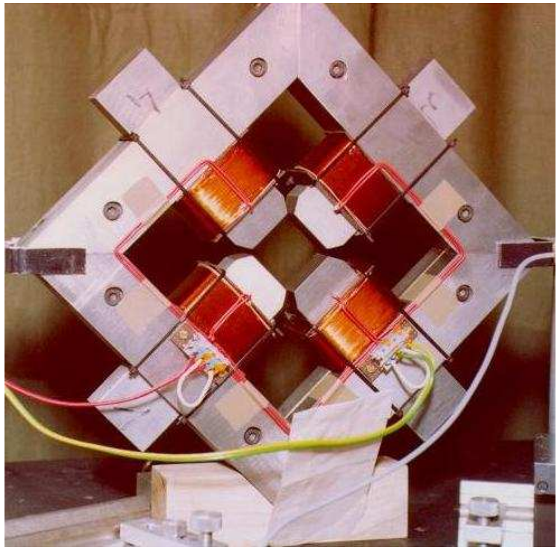
Soustavy lin. r.: monitorování tech. stavu letadel, projekt s Honeywell

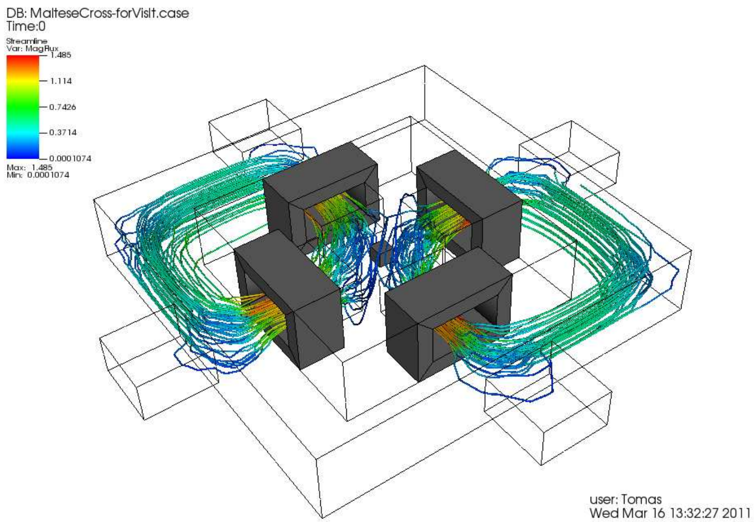




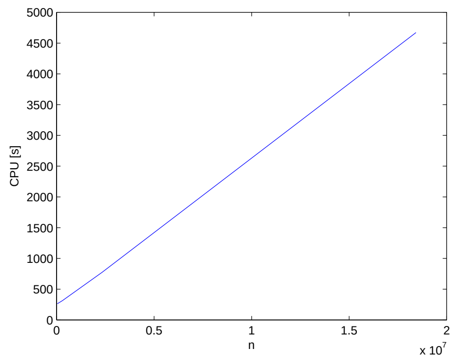
Od Pythagorovy věty k super-počítání

Soustavy l.r.: mag. pole elektromagnetu — 18 milionů rovnic/neznámých





úroveň	počet hran	PCG iter.	CPU	Mem
0	39.310	1	4 min 23 s	269 MB
1	299.166	3	5 min 20 s	834 MB
2	2.333.312	3	13 min	5,14 GB
3	18.428.912	3	1 h 18 min	39,64 GB



1 hodina na notebooku — 18 GFlops: Multigrid vyřeší 14 milionů rovnic

Od Pythagorovy věty k super-počítání

Osnova

- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání
- Kvíz

Od Pythagorovy věty k super-počítání

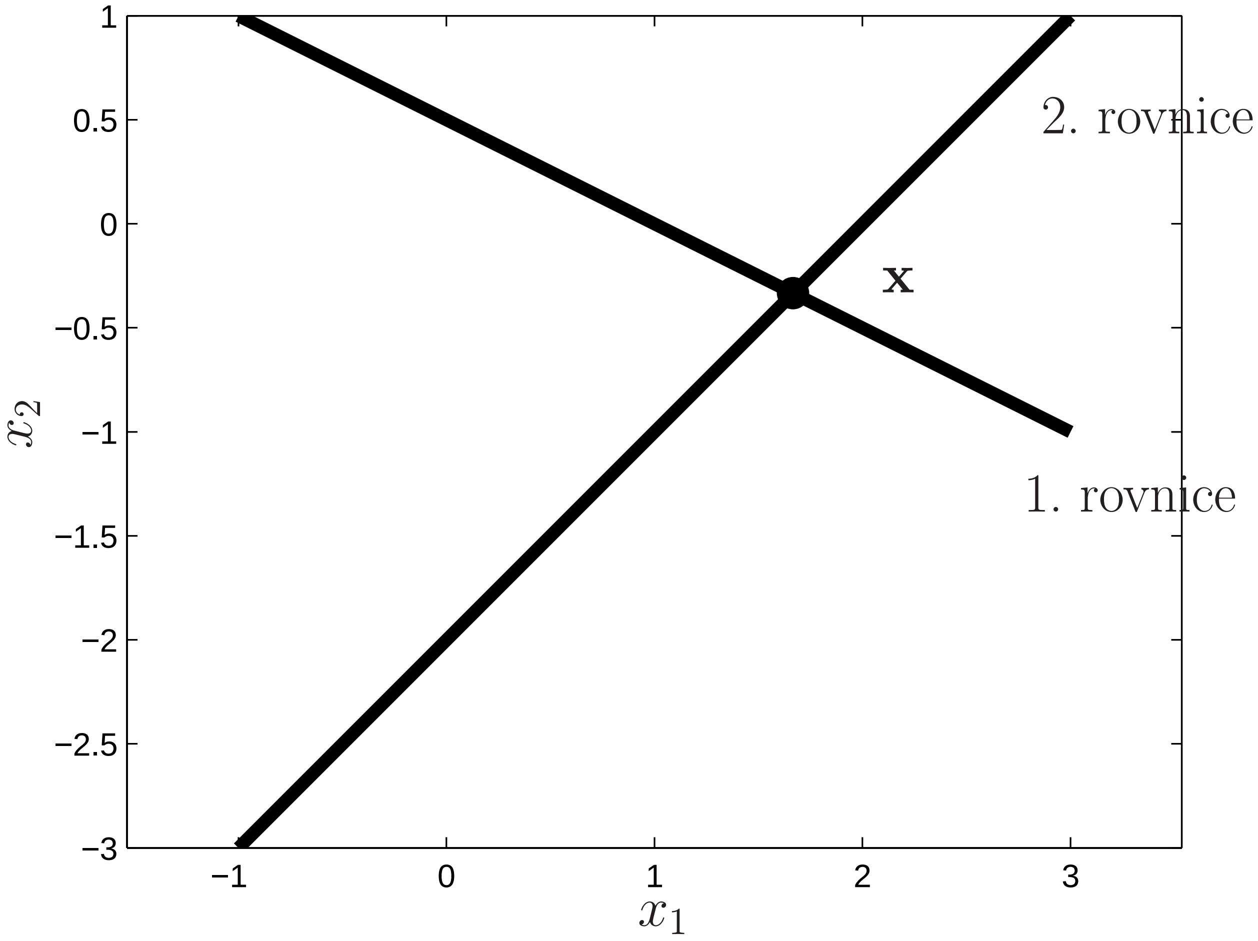
Osnova

- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání
- Kvíz

Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po řádcích

$$\begin{aligned} x_1 + 2x_2 &= 1 \\ x_1 - x_2 &= 2 \end{aligned}$$

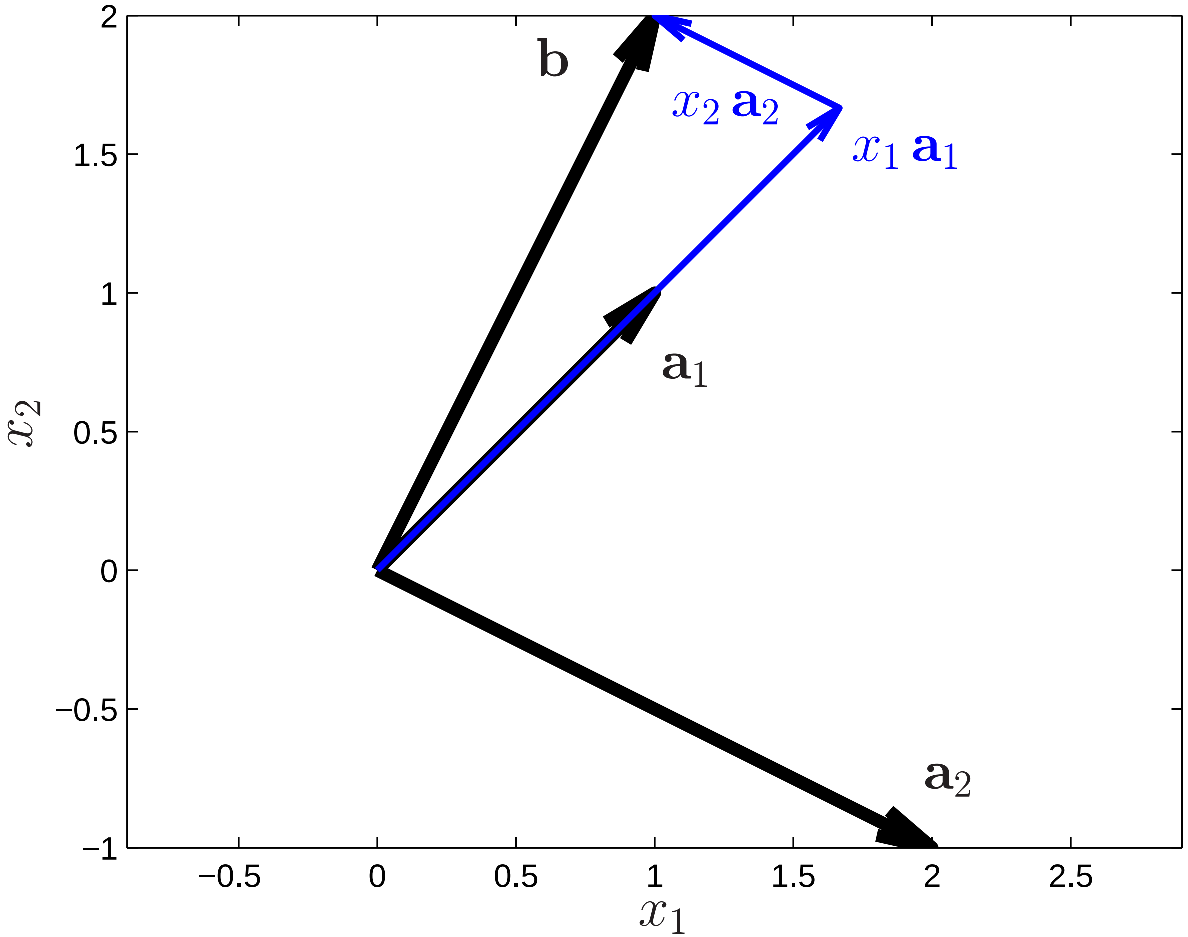


Geometrie soustav lineárních rovnic

Pohled po sloupcích

$$
\begin{aligned}
x_1 + 2\,x_2 &= 1 \\
x_1 - x_2 &= 2
\end{aligned}
$$

$$
x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ -1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}
$$

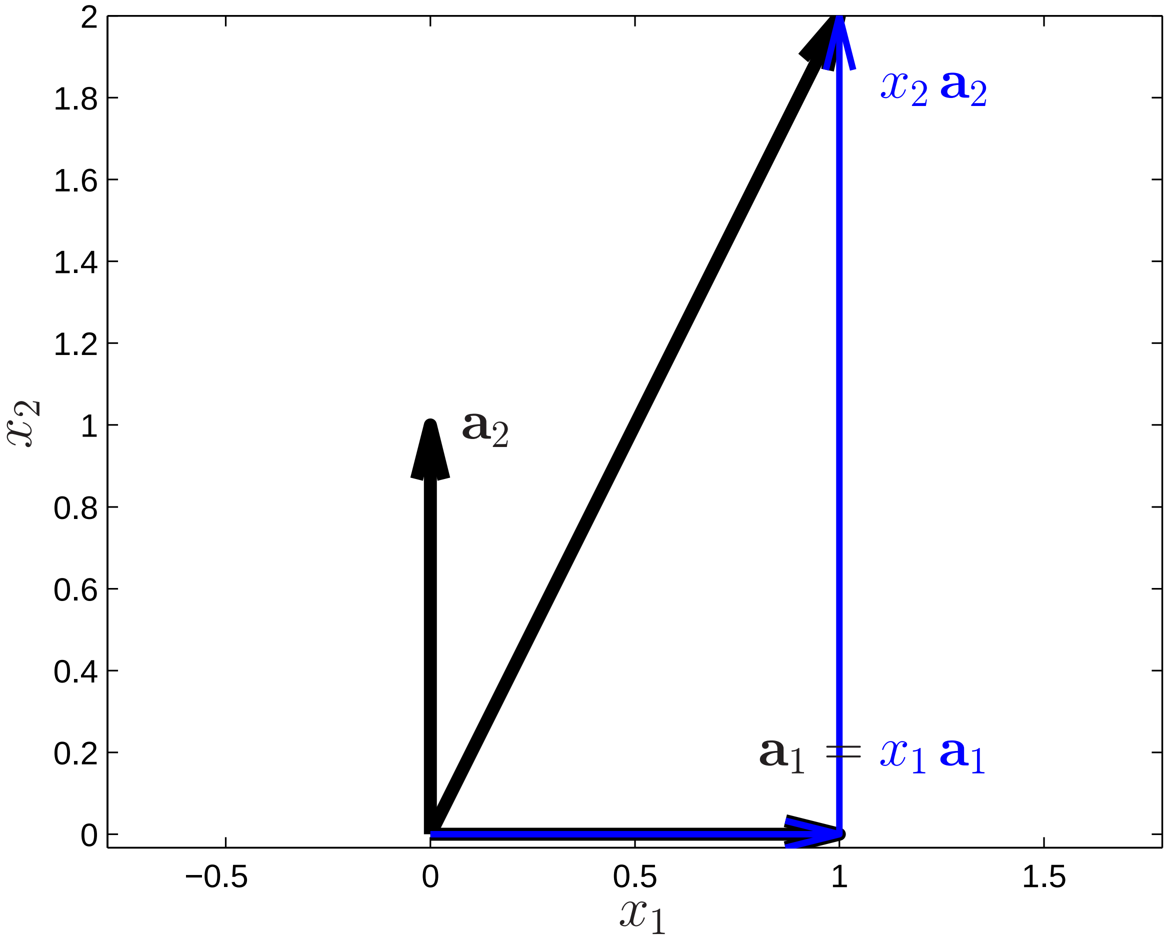


Geometrie soustav lineárních rovnic

Nejjednodušší soustavy: x_1, x_2 „řešíme" nezávisle

$$\begin{aligned} x_1 \qquad &= 1 \\ x_2 &= 2 \end{aligned}$$

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

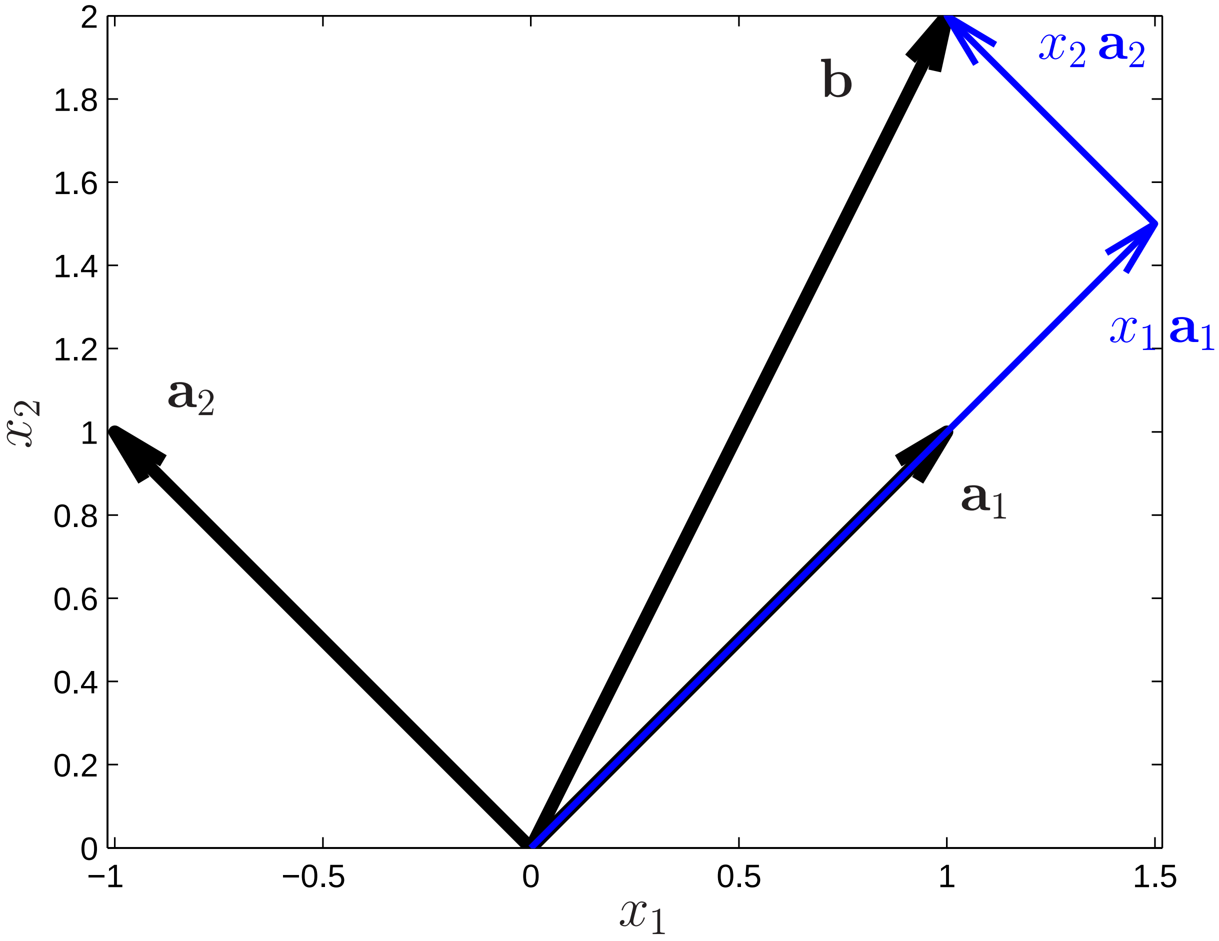


Geometrie soustav lineárních rovnic

x_1, x_2 řešíme nezávisle $\Leftrightarrow$ $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2$

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$$

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$



Od Pythagorovy věty k super-počítání

Osnova

- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání
- Kvíz

Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Pythagorova věta

$$\|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 = \|\mathbf{c}\|^2,$$

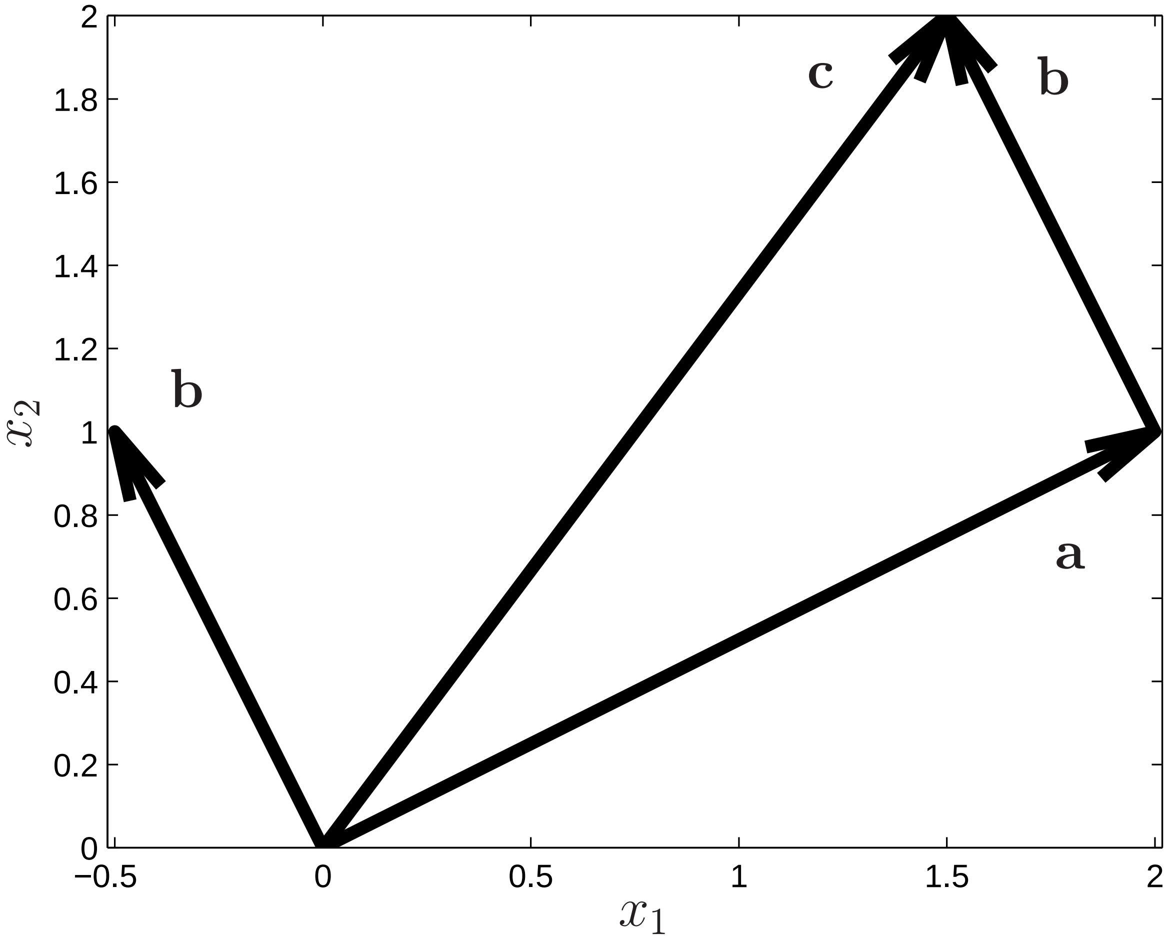
kde

$$\|\mathbf{a}\| = \sqrt{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}$$

je norma vektoru a

$$\mathbf{x} \cdot \mathbf{y} := x_1 y_1 + x_2 y_2 + \dots$$

je skalární součin vektorů.



Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Kolmost neboli ortogonalita

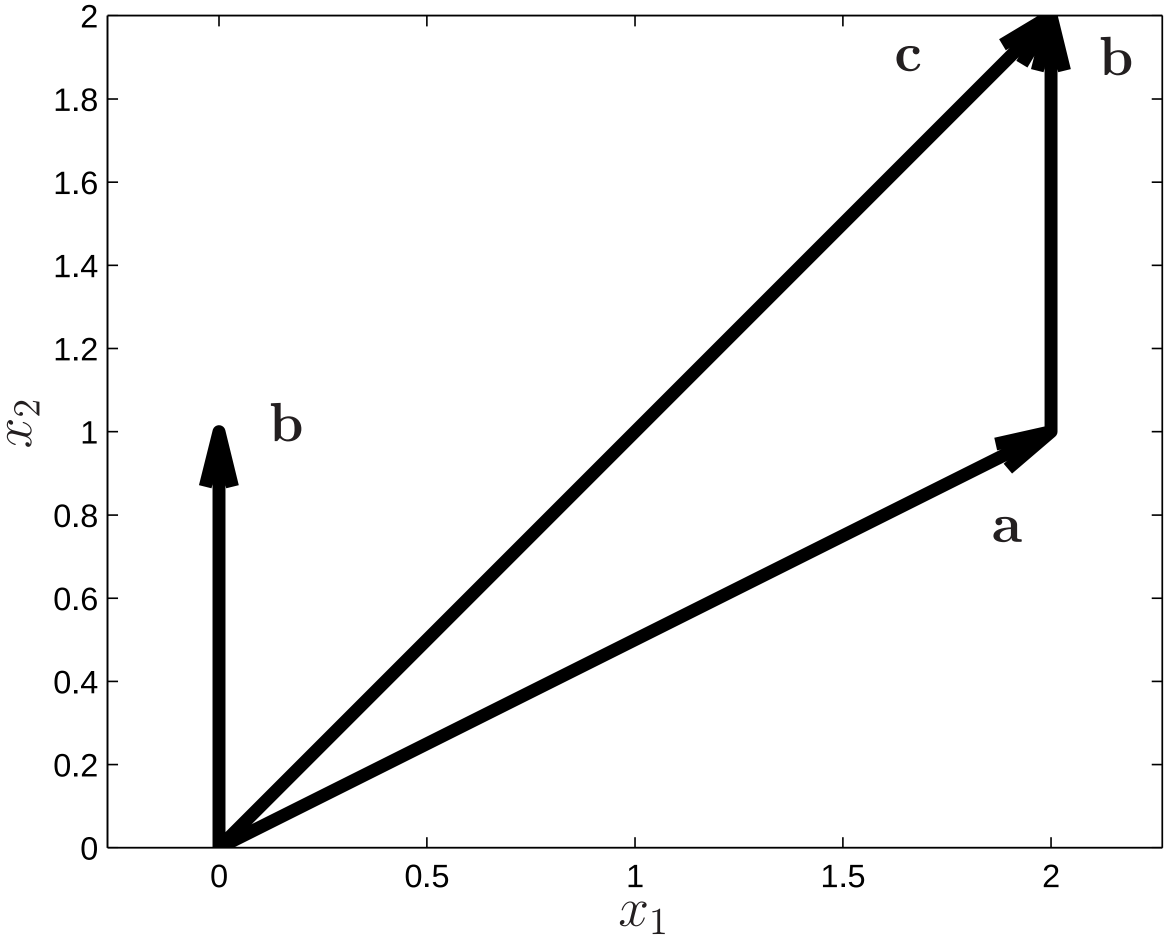
$$\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{c},$$

t.j.

$$(\mathbf{a} + \mathbf{b}) \cdot (\mathbf{a} + \mathbf{b}) = \mathbf{c} \cdot \mathbf{c},$$

t.j.

$$\|\mathbf{a}\|^2 + \|\mathbf{b}\|^2 + 2\, \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \|\mathbf{c}\|^2.$$



Tedy pro $\mathbf{a}, \mathbf{b} \neq \mathbf{0}$:

$$\mathbf{a} \perp \mathbf{b} \;\Leftrightarrow\; \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0.$$

Míra kolmosti:

$$\cos\alpha = \frac{\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}}{\|\mathbf{a}\|\,\|\mathbf{b}\|}$$

Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Ortogonální projekce vektoru b na vektor (přímku) a

Hledám $x \in \mathbb{R}$:

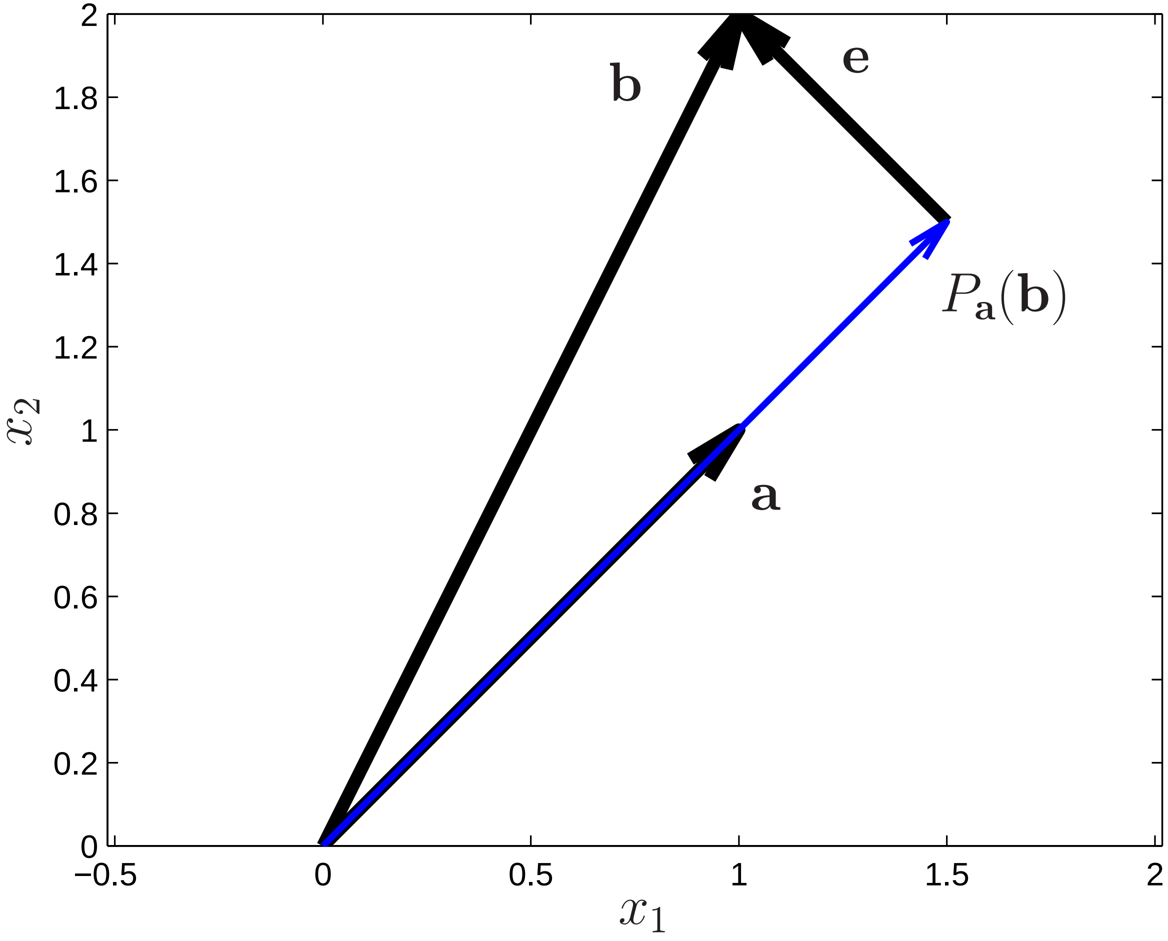
$$\mathbf{b} - x\,\mathbf{a} =: \mathbf{e} \perp \mathbf{a},$$

t.j.

$$(\mathbf{b} - x\,\mathbf{a}) \cdot \mathbf{a} = 0,$$

t.j.

$$x = \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}}{\mathbf{a} \cdot \mathbf{a}}, \quad P_{\mathbf{a}}(\mathbf{b}) := x\,\mathbf{a}.$$



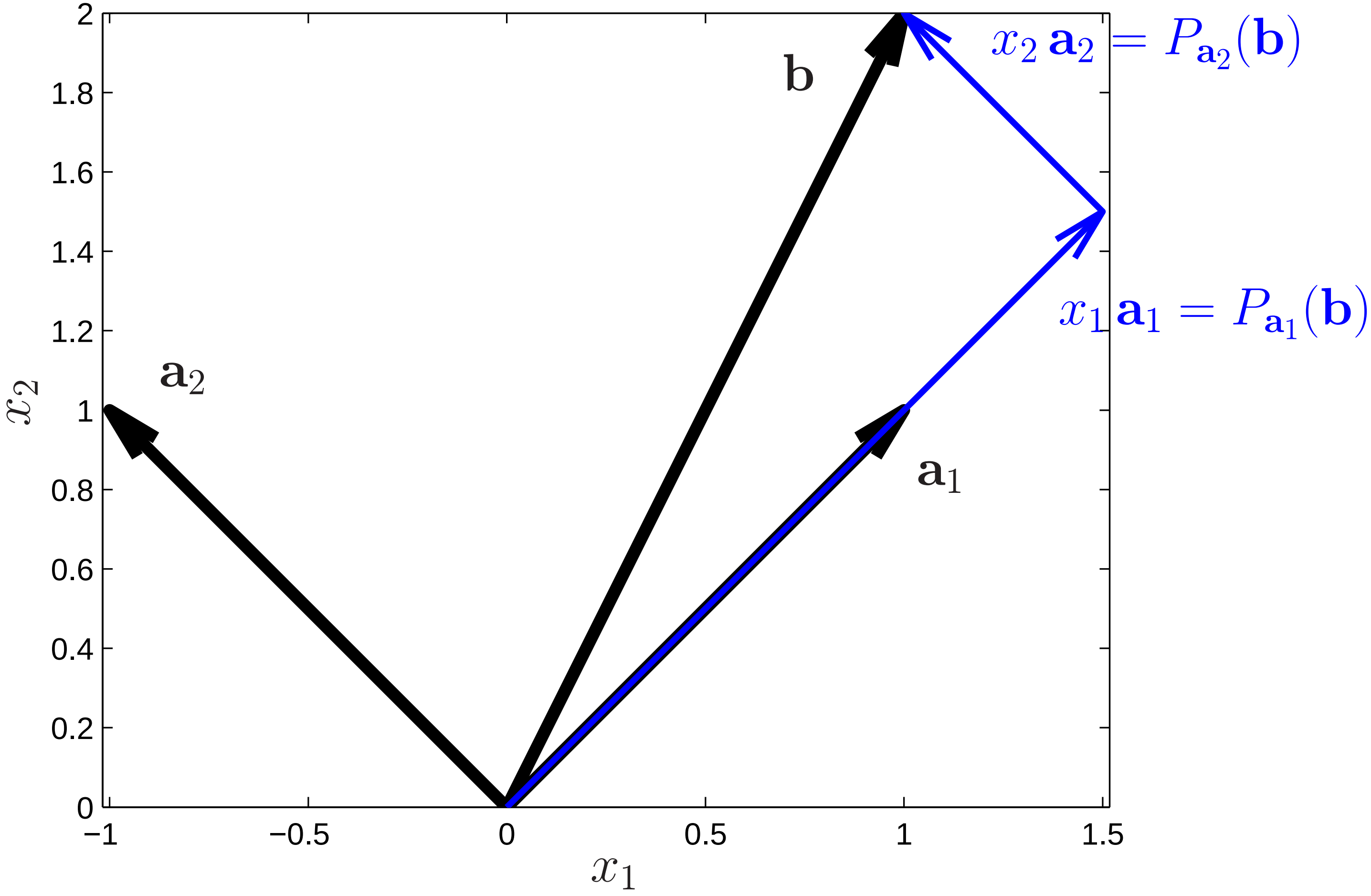
Geometrie soustav lineárních rovnic

x_1**,** x_2 **řešíme nezávisle** $\Leftrightarrow$ $\mathbf{a}_1 \perp \mathbf{a}_2$

$$\begin{aligned} x_1 - x_2 &= 1 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$$

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

$$x_1 = \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}_1}{\|\mathbf{a}_1\|^2}, \quad x_2 = \frac{\mathbf{b} \cdot \mathbf{a}_2}{\|\mathbf{a}_2\|^2}$$



Pythagorova věta a JPEG

Projekce vektoru do (hyper)roviny: JPEG komprese

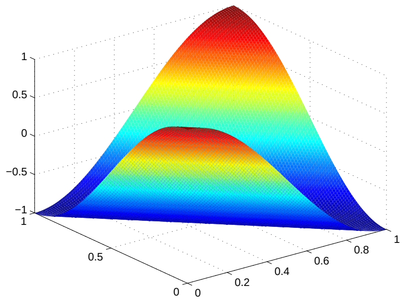
bitmapa

5%-komprese Fourierovou bází

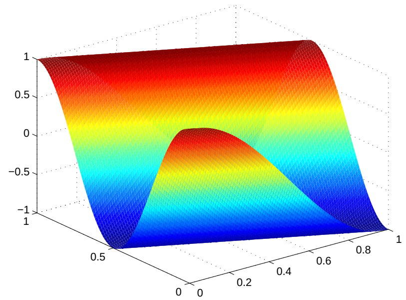
Pythagorova věta a JPEG

JPEG: Fourierova L2–ortogonální báze $f_{jk}(x,y) := \mathrm{e}^{\imath\omega(jx+ky)}$

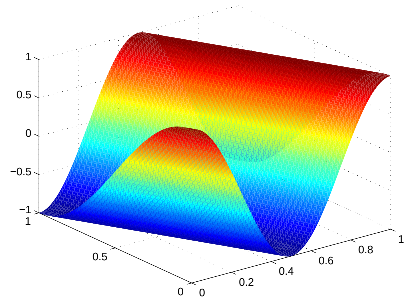
$\mathrm{Re}\, f_{11}(x,y)$



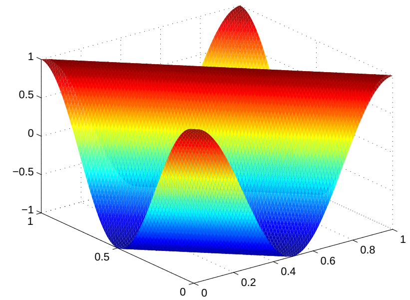
$\mathrm{Re}\, f_{12}(x,y)$



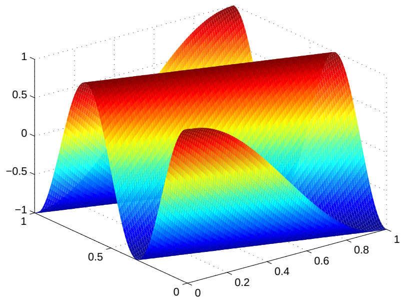
$\mathrm{Re}\, f_{21}(x,y)$



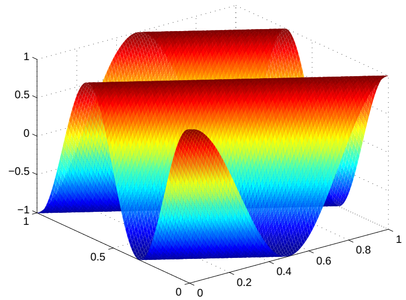
$\mathrm{Re}\, f_{22}(x,y)$



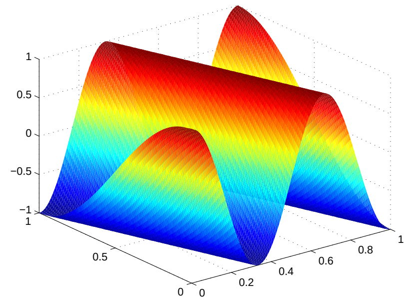
$\mathrm{Re}\, f_{13}(x,y)$



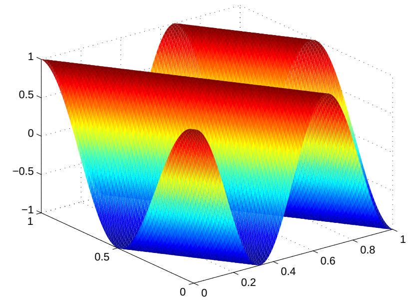
$\mathrm{Re}\, f_{23}(x,y)$



$\mathrm{Re}\, f_{31}(x,y)$



$\mathrm{Re}\, f_{32}(x,y)$



Ortogonalita (v L2 skalárním souèinu) $\Longrightarrow$ **rychlá komprese**

Pythagorova věta a JPEG

Projekce vektoru do (hyper)roviny: Lena — „první dáma internetu”

Lena Sjööblom, playmate 1972

Lena Söderberg, 1997

Metoda nejmenších čtverců

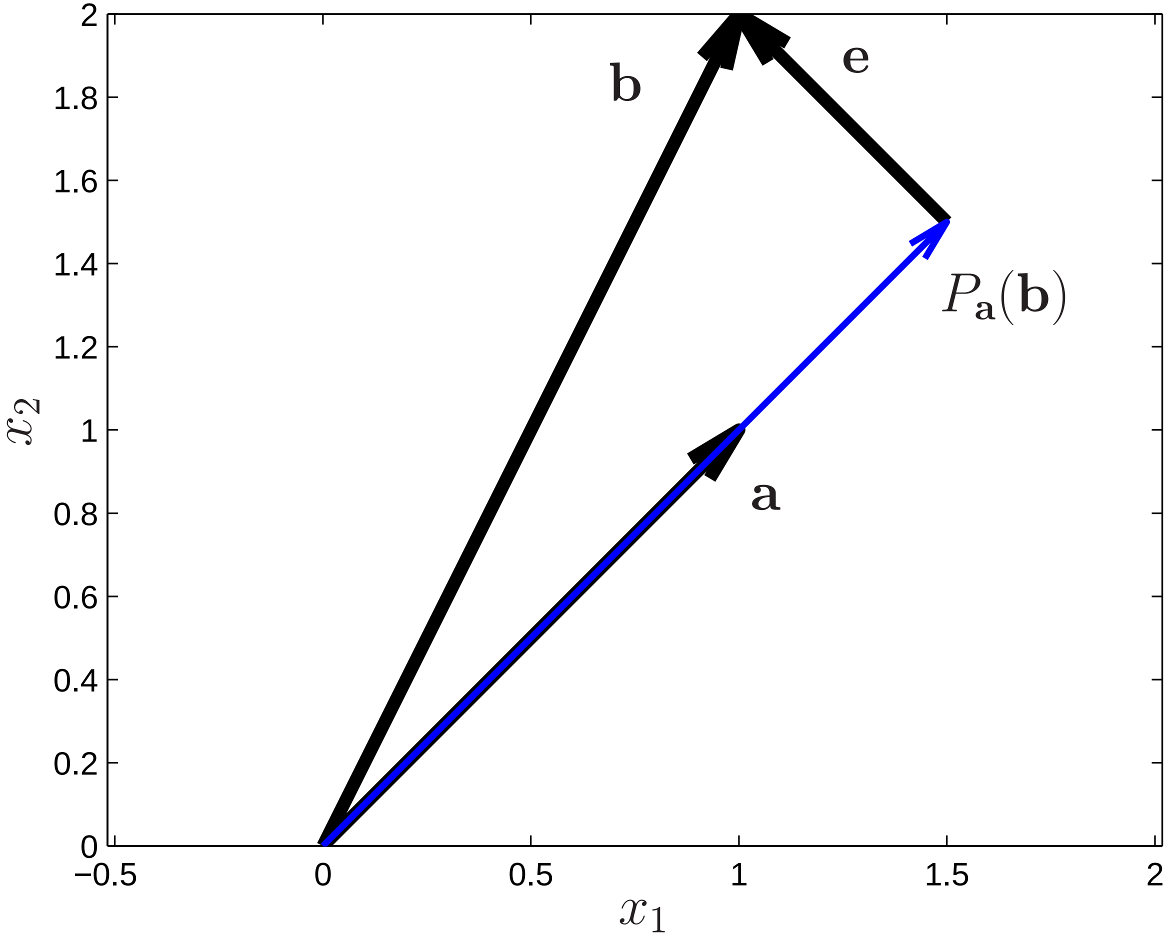
Ortogonální projekce vektoru b na vektor (přímku) a

$$x = 2$$
$$x = 1$$

$$x \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

Nejlepší kandidát na řešení je $\widehat{x} \in \mathbb{R}$:

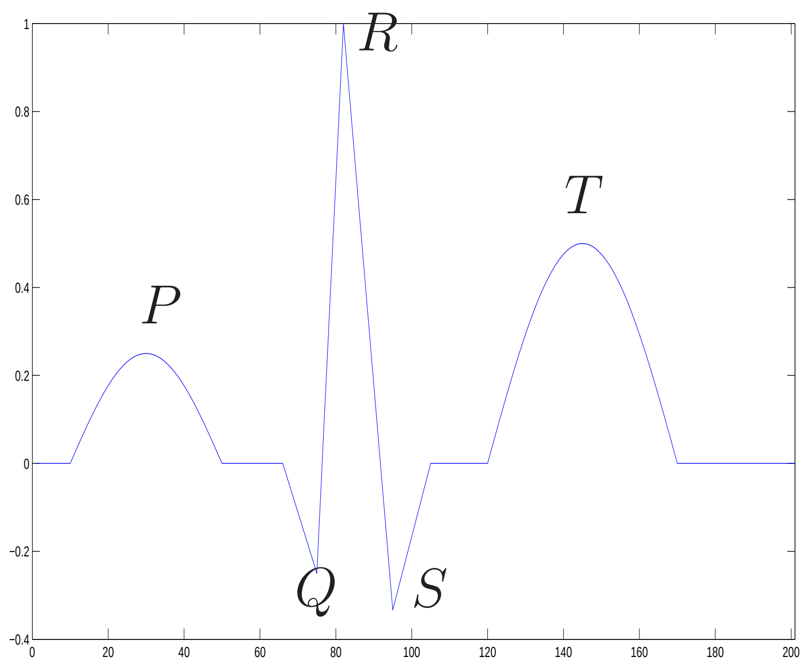
$$\widehat{x}\,\mathbf{a} = P_{\mathbf{a}}(\mathbf{b}).$$

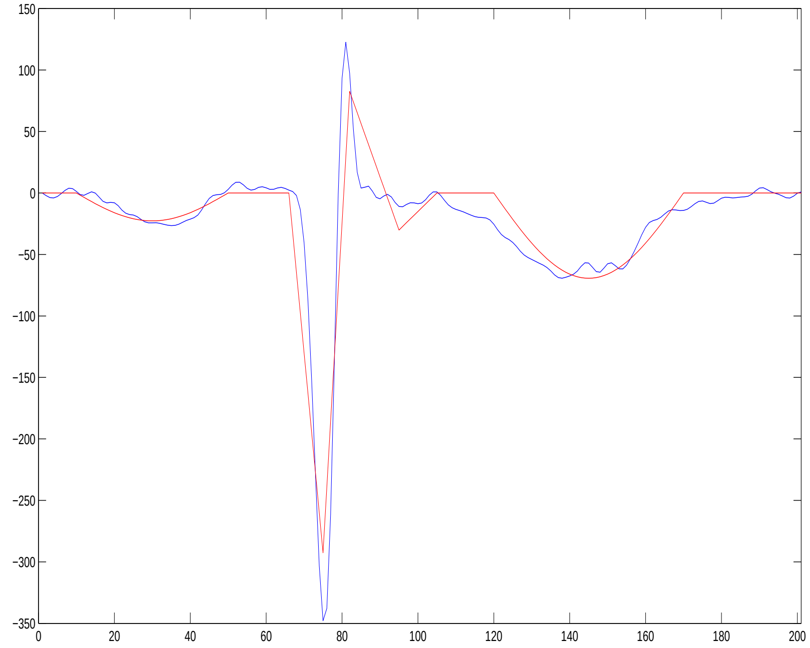


Proložení EKG signálu lékařským modelem

Projekce vektoru do (hyper)roviny: zpracování EKG signálu

model EKG signálu **„fitování" naměřeného signálu modelem**



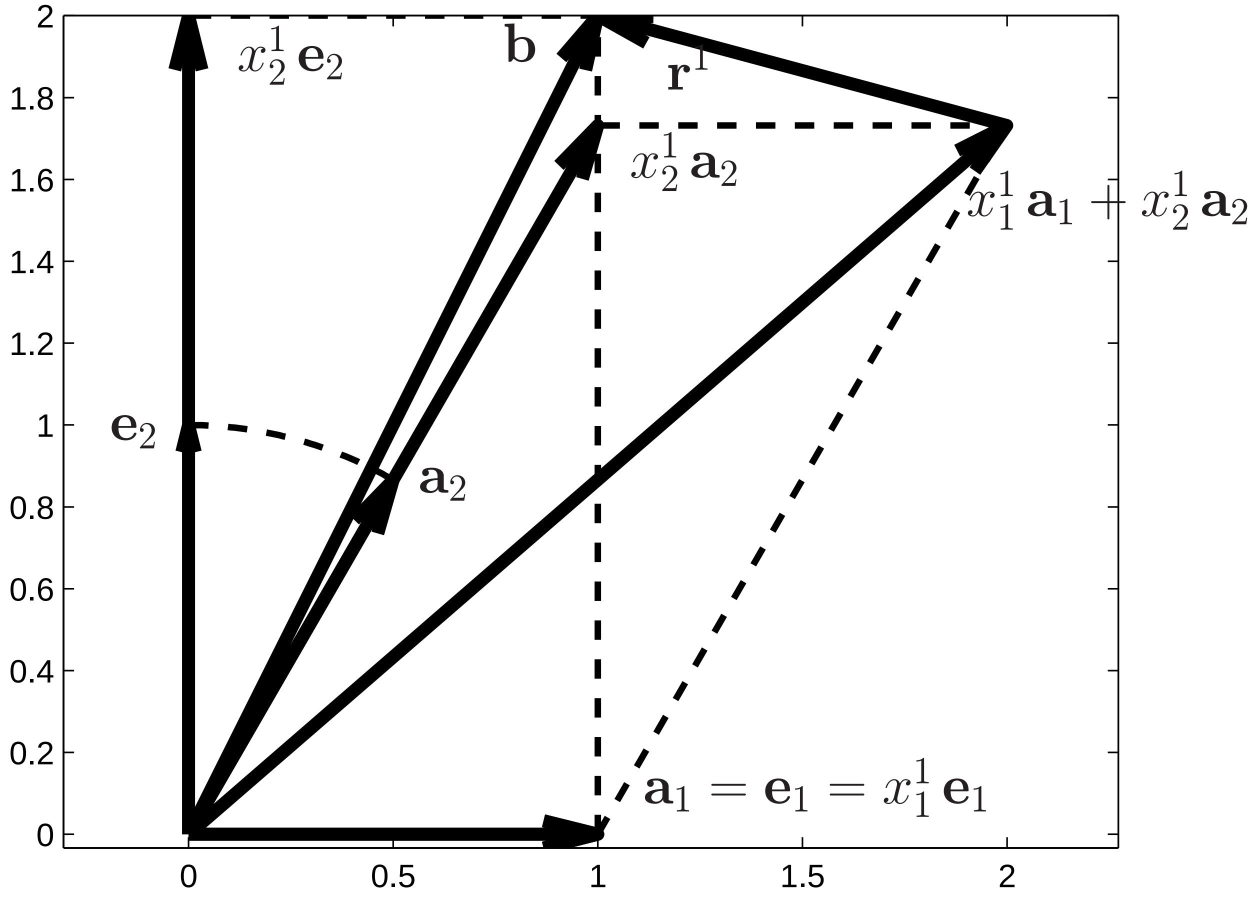


Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Přibližné řešení soustav metodou prostých iterací — 1. iterace

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

$\mathbf{x}^0 := \mathbf{0}$
$\mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - x_1^0\,\mathbf{a}_1 - x_2^0\,\mathbf{a}_2$
$k := 0$
while $\|\mathbf{r}^k\|/\|\mathbf{r}^0\| > \varepsilon$ **do**
  $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \mathbf{r}^k$
  $\mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2$
  $k := k + 1$
end while
$\mathbf{x}^k$ je přibližné řešení

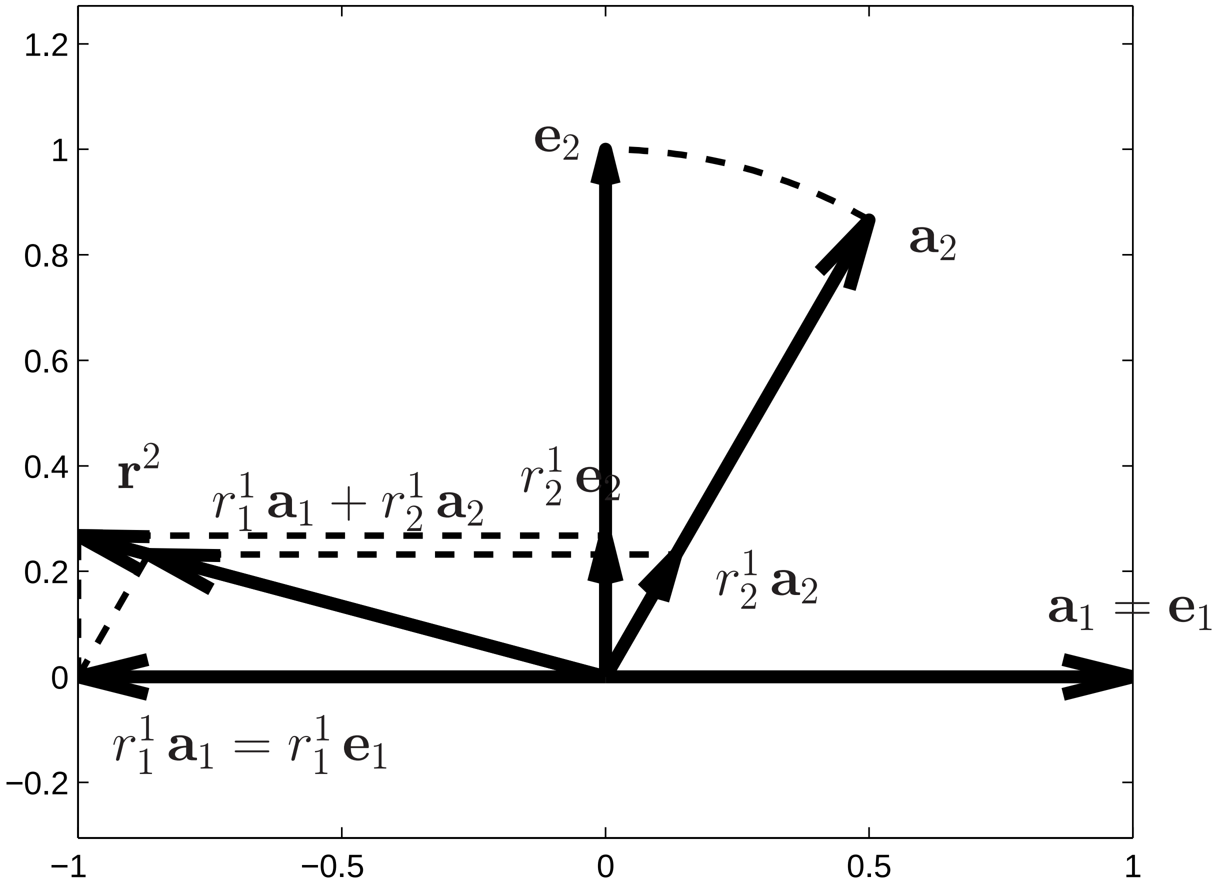


Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Přibližné řešení soustav metodou prostých iterací — 2. iterace

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix}1\\0\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix}\cos\alpha\\ \sin\alpha\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix}1\\2\end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

$\mathbf{x}^0 := \mathbf{0}$
$\mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - x_1^0\,\mathbf{a}_1 - x_2^0\,\mathbf{a}_2$
$k := 0$
while $\|\mathbf{r}^k\|/\|\mathbf{r}^0\| > \varepsilon$ **do**
  $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \mathbf{r}^k$
  $\mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2$
  $k := k + 1$
end while
$\mathbf{x}^k$ je přibližné řešení

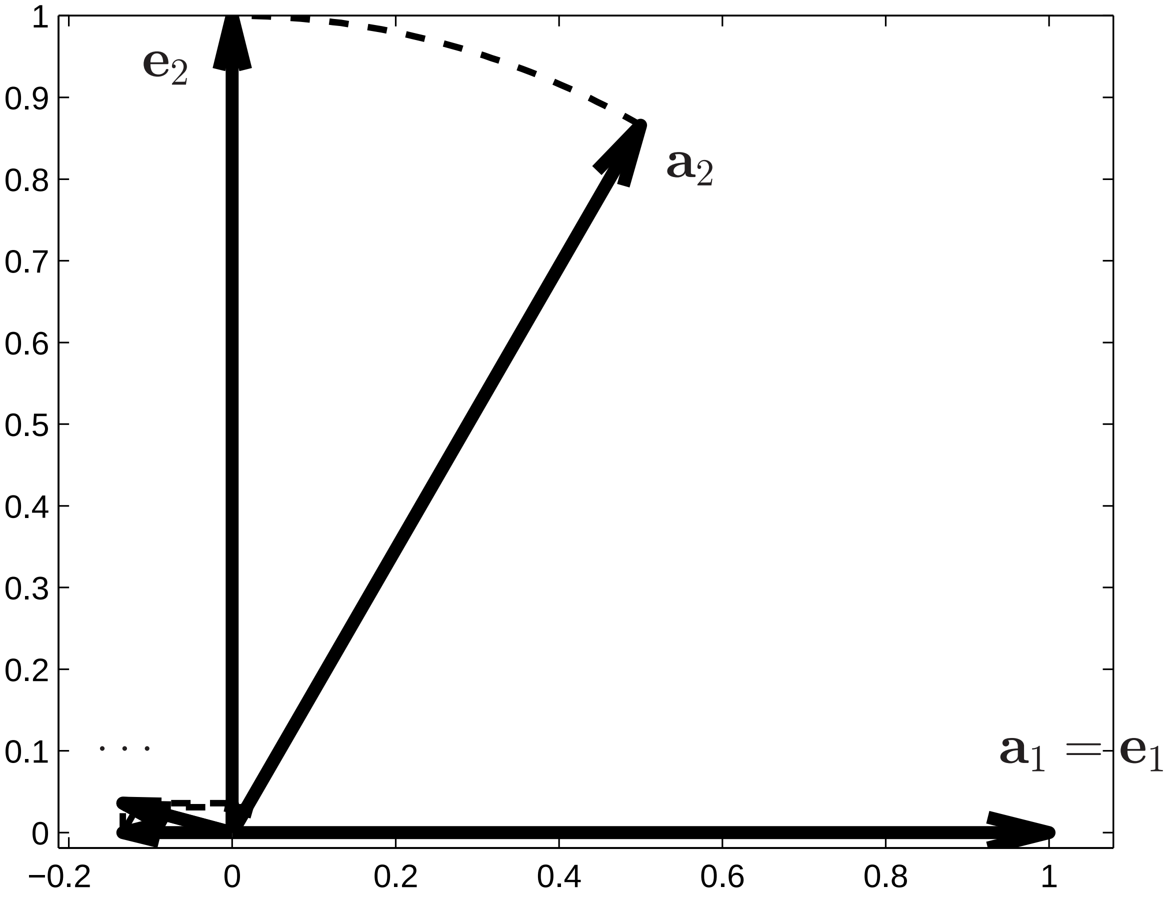


Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Přibližné řešení soustav metodou prostých iterací — 3. iterace

$$x_1 \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_1} + x_2 \underbrace{\begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{a}_2} = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}}_{=:\mathbf{b}}$$

$\mathbf{x}^0 := \mathbf{0}$
$\mathbf{r}^0 := \mathbf{b} - x_1^0\,\mathbf{a}_1 - x_2^0\,\mathbf{a}_2$
$k := 0$
while $\|\mathbf{r}^k\|/\|\mathbf{r}^0\| > \varepsilon$ **do**
  $\mathbf{x}^{k+1} := \mathbf{x}^k + \mathbf{r}^k$
  $\mathbf{r}^{k+1} := \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2$
  $k := k+1$
end while
$\mathbf{x}^k$ je přibližné řešení



Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Analýza konvergence metody prostých iterací

$$\mathbf{a}_1 := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \ \mathbf{a}_2 := \begin{pmatrix} \cos\alpha \\ \sin\alpha \end{pmatrix} : \quad \begin{aligned} \mathbf{r}^{k+1} &= \mathbf{b} - x_1^{k+1}\,\mathbf{a}_1 - x_2^{k+1}\,\mathbf{a}_2 \\ &= \mathbf{b} - \left(x_1^k + r_1^k\right)\mathbf{a}_1 - \left(x_2^k + r_2^k\right)\mathbf{a}_2 \\ &= \mathbf{r}^k - r_1^k\,\mathbf{a}_1 - r_2^k\,\mathbf{a}_2 \\ &= r_2^k \begin{pmatrix} -\cos\alpha \\ 1-\sin\alpha \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\|\mathbf{r}^{k+1}\|^2 = \mathbf{r}^{k+1}\cdot\mathbf{r}^{k+1} = \left(r_2^k\right)^2 \underbrace{\left[\cos^2\alpha + (1-\sin\alpha)^2\right]}_{=2(1-\sin\alpha)=:K_\alpha} \le \|\mathbf{r}^k\|^2\,K_\alpha$$

Metoda konverguje pro $\alpha \in (\pi/6, 5\pi/6) \cup (-5\pi/6, \pi/6)$: $\frac{\|\mathbf{r}^{k+1}\|}{\|\mathbf{r}^k\|} \le \sqrt{2(1-\sin\alpha)} < 1$.
Přesnosti ε je dosaženo v $k \ge \log\varepsilon / \log\sqrt{K_\alpha}$ iteracích.

Zpřesnění řešení o 1 řád vyžaduje konstantní počet iterací.

Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání

Zlepšení konvergence metody prostých iterací — předpodmínění

$$x_1\,\mathbf{a}_1 + x_2\,\mathbf{a}_2 = \mathbf{b}$$

Hledáme dva různé směry $\mathbf{c}_1, \mathbf{c}_2 \neq \mathbf{0}$ tak, aby modifikovaná ekvivalentní soustava měla kolmější sloupce

$$x_1 \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{a}_1 \\ \mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{a}_1 \end{pmatrix} + x_2 \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{a}_2 \\ \mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{a}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{c}_1 \cdot \mathbf{b} \\ \mathbf{c}_2 \cdot \mathbf{b} \end{pmatrix}.$$

Od Pythagorovy věty k super-počítání

Osnova

- Geometrie soustav lineárních rovnic
- Souvislost Pythagorovy věty a superpočítání
- Kvíz

Kvíz

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic

Jakou největší čtvercovou soustavu lineárních rovnic by vypočítal za 1 hodinu nejlepší, viz www.top500.org, počítač na světě, čínský Tianhe-2, Kramerovým pravidlem bez použití řádkových úprav, uvažujeme-li pouze instrukce sčítání, odčítání, násobení a dělení, kterých provede $33,8 \cdot 10^{15}$ za sekundu?

Kvíz

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic: počet operací

Uvažujme soustavu n lineárních rovnic o n neznámých mající právě jedno řešení.

Kramerovo pravidlo

$$x_i = \frac{D_i}{D} \quad \text{pro } i = 1, 2, \dots, n$$

vyžaduje n dělení a výpočet $n+1$ determinantů řádu n. Např. pro $n=3$

$$D = \begin{vmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{vmatrix} = 1 \begin{vmatrix} 5 & 6 \\ 8 & 9 \end{vmatrix} - 2 \begin{vmatrix} 4 & 6 \\ 7 & 9 \end{vmatrix} + 3 \begin{vmatrix} 4 & 5 \\ 7 & 8 \end{vmatrix} = 1 \cdot (5 \cdot 9 - 6 \cdot 8) - 2 \cdot (4 \cdot 9 - 6 \cdot 7) + 3 \cdot (4 \cdot 8 - 5 \cdot 7)$$

je třeba $\mathrm{N}(3) = 3 + 3\,\mathrm{N}(2) = 3 + 3 \cdot 2$ násobení a $\mathrm{M}(3) = 2 + 3\,\mathrm{M}(2)$ sčítání/odčítání.

Kramerovo pravidlo s výpočtem determinantů rozvojem podle řádků vyžaduje

- n dělení,
- $(n+1)\,\mathrm{N}(n)$ násobení, kde $\mathrm{N}(n) = n\,(1 + \mathrm{N}(n-1))$ a $\mathrm{N}(1) = 0$ a
- $(n+1)\,\mathrm{M}(n)$ sčítání/odčítání, kde $\mathrm{M}(n) = n - 1 + n\,\mathrm{M}(n-1)$ a $\mathrm{M}(1) = 0$.

Kvíz

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic: počet operací

Kramerovo pravidlo s výpočtem determinantů rozvojem podle řádků vyžaduje

$$\mathrm{Op}(n) = n + (n+1)\,(\mathrm{N}(n) + \mathrm{M}(n)) \text{ operací}, \quad \mathrm{CPU}(n) = \frac{\mathrm{Op}(n)}{33{,}8\mathrm{e}15}[\mathrm{s}],$$

kde $\mathrm{N}(n) = n\,(1 + \mathrm{N}(n-1))$, $\mathrm{N}(1) = 0$ a $\mathrm{M}(n) = n\,(1 + \mathrm{M}(n-1)) - 1$, $\mathrm{M}(1) = 0$.

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
N(n)	0	2	9	40	205	1236	8659	69280	623529	6236300
M(n)	0	1	5	23	119	719	5039	40319	362879	3628799
Op(n)	1	5	17	67	329	1961	13705	109607	986417	9864109
CPU(n)	3,0e-17	1,5e-16	5,0e-16	2,0e-15	9,7e-15	5,8e-14	4,1e-13	3,2e-12	2,9e-11	2,9e-10

n	11	12	13	14	15	...	18	19	20	21
N(n)	6,9e7	8,2e8	1,1e10	1,5e11	2,2e12	...	1,1e16	2,1e17	4,2e18	8,8e19
M(n)	4,0e7	4,8e8	6,2e9	8,7e10	1,3e12	...	0,6e16	1,2e17	2,4e18	5,1e19
Op(n)	1,1e8	1,3e9	1,7e10	2,4e11	3,6e12	...	1,7e16	3,3e17	6,6e18	1,4e20
CPU(n)	3,2e-9	3,9e-8	5,0e-7	7,0e-6	1,1e-4	...	0,5	9,8	195,7	4,1e3

Kvíz

Kramerovo pravidlo pro řešení soustav lin. rovnic

Jakou největší čtvercovou soustavu lineárních rovnic by vypočítal za 1 hodinu nejlepší, viz www.top500.org, počítač na světě, čínský Tianhe-2, Kramerovým pravidlem bez použití řádkových úprav, uvažujeme-li pouze instrukce sčítání, odčítání, násobení a dělení, kterých provede $33,8 \cdot 10^{15}$ za sekundu?

20 rovnic

Motto na závěr

„Raději budu počítat na starém počítači novou metodou než naopak."

Prof. Philippe Toint