

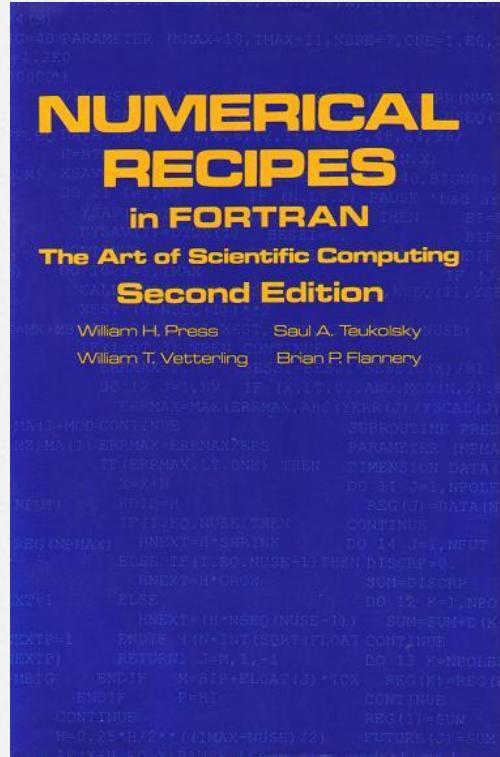
Proč nepoužívat Numerical Recipes (algoritmy pro vlastní čísla a vlastní vektory)

Martin Stachoň

Numerical Recipes

- William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery
- 1986-2007
- “Kuchařka” numerických metod
 - Lineární algebra, interpolace, integrace, náhodná čísla, FFT, statistika, diferenciální rovnice....
 - Pascal, Fortran 77, 90, C++ ...

Numerical Recipes



Numerical Recipes

- Neformální, čitelný text, bez vět a důkazů
- Zaměřeno na praktické techniky, včetně implementace v daném jazyce
- Nejprodávanější kniha v oblasti vědeckého programování, 3000+ citací

Proč ne NR?

- Copyright
- Implementace algoritmů nejsou efektivní
(neobsahují “ruční” optimalizace)
- Ne všechny algoritmy jsou aktuální, občas chyby

Copyright

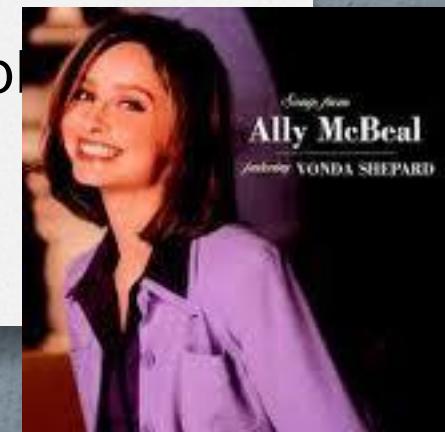
- o If you are the individual owner of a copy of this book, we hereby authorize you to type into your computer, for your own personal and noncommercial use, **one machine-readable copy of each program. You are not authorized to transfer or distribute a machine-readable copy to any other person.**

Copyright

- ➊ Many people, including the Numerical Recipes authors, believe that there ought to be good sources of non-copyrighted numerical software available. Indeed, there are such sources. However, Numerical Recipes is not one of them! When people want to create freely redistributable programs, we urge them to use these other, freeware, program libraries.

Licence NR

- Licenci NR porušíte pokud :
 - Nevlastníte knihu
 - Algoritmus zkopírujete na svůj druhý počítač
 - Necháte někoho, kdo nevlastní knihu, přepsat za vás algoritmy z knihy do PC
 - Používáte dva monitory (single screen license)
 - Cena licence pro VŠB : cca 75000 Kč/rok
 - Máte dobré právníky?



Efektivita implementace

- Whaley, R. Clint; Petitet, Antoine; and Dongarra, Jack J.; "Automated empirical optimization of software and the ATLAS project," Parallel Computing 27, 3-35 (2001).
- Rozdělením maticových operací do bloků (vs. tříkrát vnořené cykly) lze lépe využít paměť cache a urychlit maticové operace ~10x

Alternativy k NR

- BLAS+LAPACK/ATLAS
- GNU Scientific Library (C/C++)
- Trilinos

Algoritmy pro vl. čísla, vl. vektory

- Výpočet vlastních čísel a vlastních vektorů komplexní Hermitovské matice ($a_{ij} = a_{ji}^*$)
- Subrutina DEVCHF v MULTIDYN zabírá většinu procesorového času
 - || 36.1% | 5196.1 | 285.9 | 5.2% |devchf\$math_
 - || 26.7% | 3841.7 | 258.3 | 6.3% |_CABS
 - || 11.1% | 1596.1 | 130.9 | 7.6% |calculate_hh\$hamilton_
 - || 7.3% | 1049.4 | 101.6 | 8.8% |_COSS_VW
 - || 5.9% | 856.9 | 83.1 | 8.8% |get_topical_vec\$eldyn_
 - || 4.4% | 635.5 | 86.5 | 12.0% |deriv_h\$nucdyn_

- ➊ You have probably gathered by now that the solution of eigensystems is a fairly complicated business. It is. It is one of the few subjects covered in this book for which we do *not* recommend that you avoid canned routines.

Algoritmy

- Jacobi
- Tridiagonalizace+QR
- Divide and Conquer
- Relative Robust Representation

$$\begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \\ 2 & 2 & 2 \end{bmatrix}$$


Obr. 23.1 Matice a její spektrum.

Jacobiho algoritmus

- Carl Gustav Jacob Jacobi, 1846
- Použito v MULTIDIS
- Transformace matice na podobnou diagonální matici QDQ^T
- Q – ortogonální matice rovinné rotace, která vynuluje jeden prvek matice
- Jednou vynulovaný prvek se může znova stát nenulový
- Přesnost, nejpomalejší

Tridiagonalizace

- Ortogonální transformace na podobnou tridiagonální matici
- Konečný počet kroků
- Transformace
 - Givensovy (stejné jako u Jacobiho metody)
 - Householderovy – matice zrcadlení, poloviční počet operací

QR algoritmus

- Nalezení vl. čísel a vl. vektorů pomocí QR rozkladu
- $A = RQ, U = I$
- $A_{k+1} = R_k Q_k, U_{k+1} = U_k Q_k$
- A_k konverguje k horní trojúhelníkové matici s vl. čísly na diagonále, U_k vlastní vektory

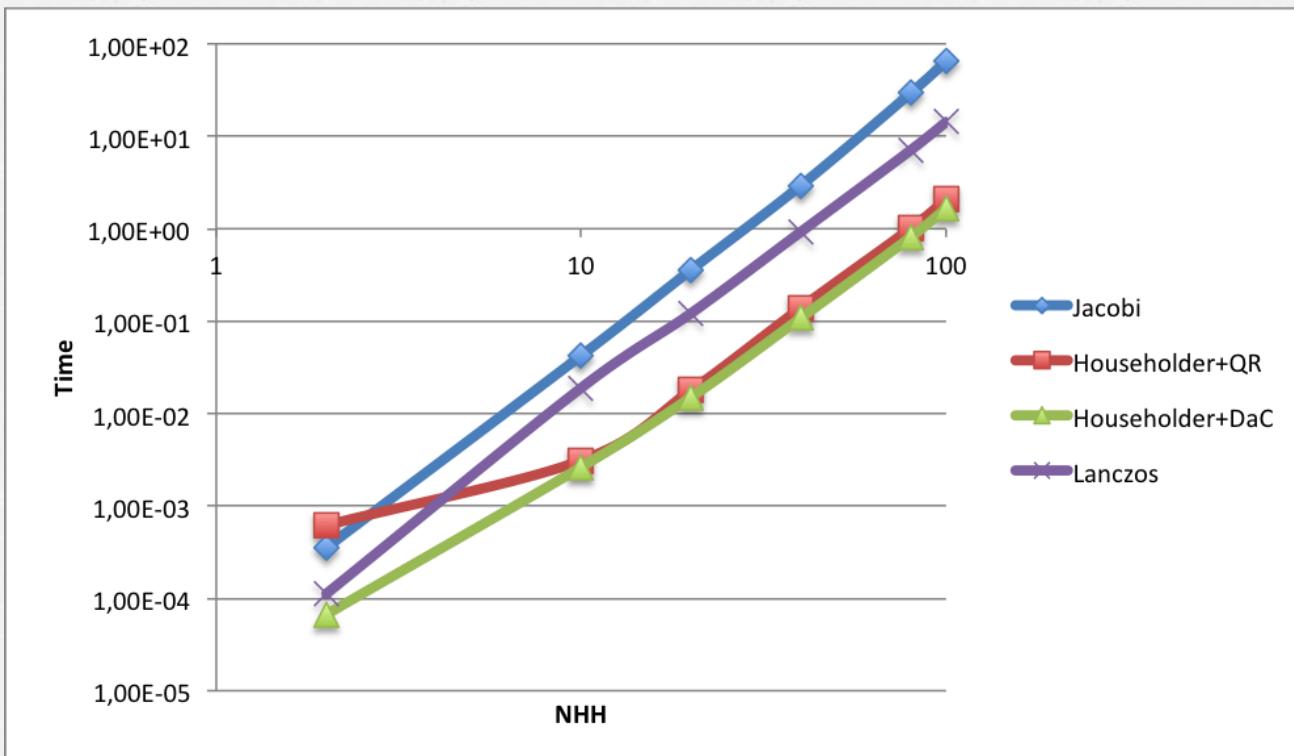
Divide and conquer

- Nová metoda, 90. léta
- Rychlejší než QR
- Rekurzivní rozdělení matice na diagonální bloky + doplněk
- Diagonalizace bloků (např. pomocí QR)
- Řešení původní úlohy – sekulární rovnice (Newtonova metoda)
- Problémy s konvergencí v MULTIDIS

Relatively Robust Representation

- Nejnovější metoda, $O(n^2)$
- Nejrychlejší
- VI. čísla pomocí DQDS
- VI. Vektory pomocí LDL^T reprezentací
- "A new $O(n^2)$ algorithm for the symmetric tridiagonal eigenvalue/eigenvector problem", by Inderjit Dhillon, Computer Science Division Technical Report No. UCB/CSD-97-971, UC Berkeley, May 1997.

Měření - diagonalizace

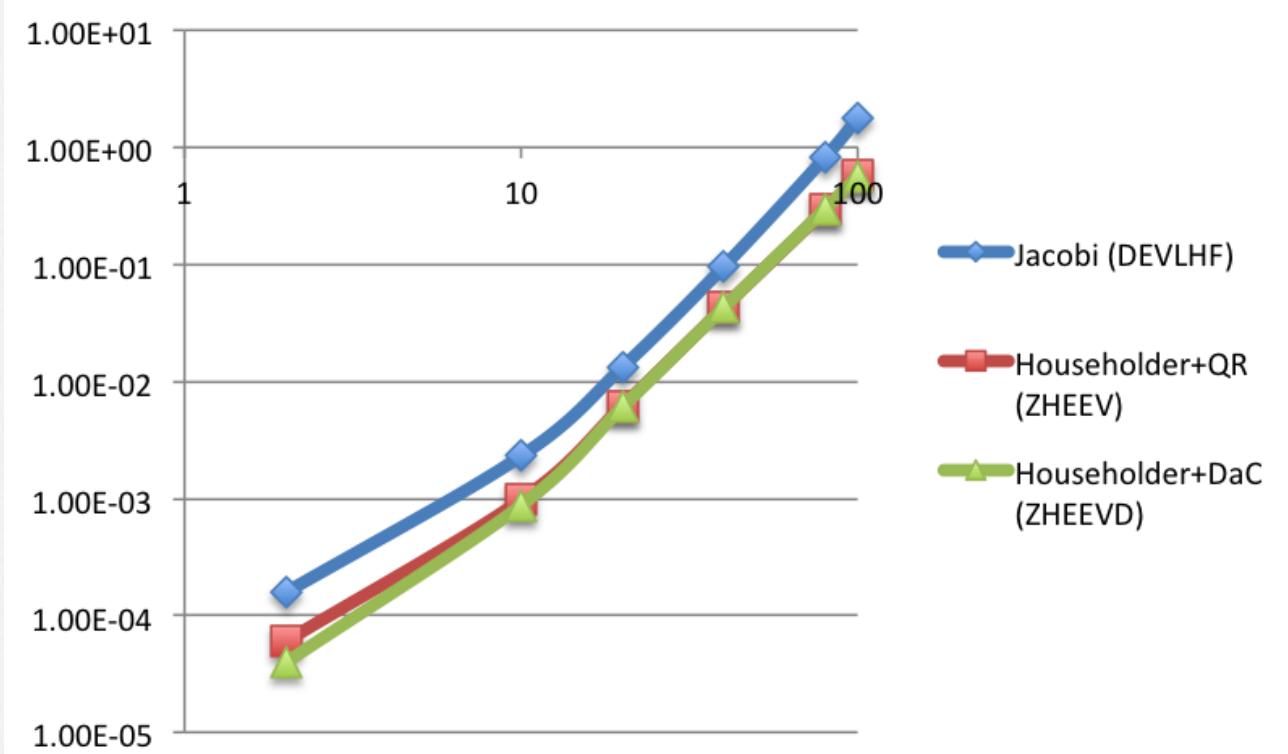


Diagonalizace matice

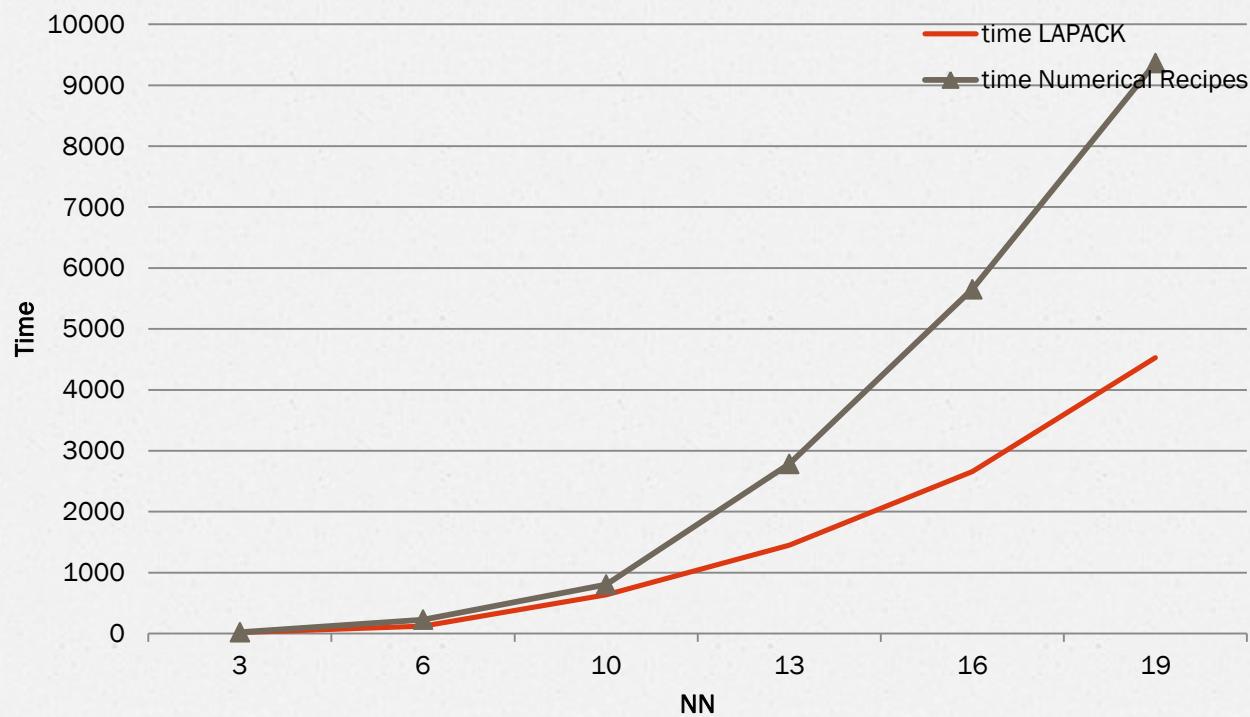
6000 x 6000

Metoda	Čas (s)	Urychlení
Jacobi NR	61321 (17h)	
QR LAPACK	1413	43x
Divide and Conquer LAPACK	998	61x
MRRR LAPACK	898 (15min)	68x

Měření – vl. čísla



Měření - MULTIDIS



Výhled do budoucna

- Vyzkoušet další metody
- Využít speciálních vlastností Hamiltoniánu

Reference

- <http://www.nr.com/> oficiální stránka
- http://en.wikipedia.org/wiki/Numerical_Recipes
- <http://mingus.as.arizona.edu/~bjw/software/boycottnr.html> Boycott Numerical Recipes
- <http://www.uwyo.edu/buerkle/misc/wnotnr.html> Why not use Numerical Recipes