Ονοματεπώνυμο: .... Α.Μ. ....· Έτος ...

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι *Σεπτέμβριος 2005*

*ΚΑΛΗ ΕΠΙΤΥΧΙΑ!!! Διαβάστε προσεκτικά τις εκφωνήσεις (**2 σελίδες**). Για πλήρη αξιολόγηση του γραπτού σας πρέπει να παρουσιάσετε όλο σας τον συλλογισμό και όλα τα ενδιάμεσα αποτελέσματα. Έχετε 3 ώρες. Οι αλγόριθμοι να περιγράφονται με σαφήνεια, π.χ. όπως στις σημειώσεις ή με MATLAB . Εάν κατά τη περιγραφή ενός αλγορίθμου απαιτηθεί η διάσπαση Cholesky, μπορείτε να χρησιμοποιήσετε κατευθείαν την εντολή της MATLAB ,* `R = chol(A)` *όπου R είναι άνω τριγωνικό μητρώο τέτοιο ώστε* $R^* \cdot R = A$.

I. *(20 β.)*

1. Να περιγράψετε με συντομία τα τρία βασικά κριτήρια αξιολόγησης στον Επιστημονικό Υπολογισμό.
2. Στην προσπάθεια να μετρηθεί η επίδοση μιας συνάρτησης `flat` γραμμένης σε MATLAB , εκτελέστηκαν οι παρακάτω εντολές σε περιβάλλον MATLAB :

   ```
   tic; [x,ops]=flat; val=ops/toc/1e6; end;
   ```

   όπου `x` είναι κάποιο αποτέλεσμα που υπολογίζει η flat και `ops` είναι το πλήθος πράξεων α.κ.υ. της `flat`. Να εξηγήσετε τι μετρά το `val`.
3. Να αναφέρετε ένα λόγο για τον οποίο θα μπορούσε να επιστραφεί η τιμή `Inf` στο `val` όταν εκτελείται το παραπάνω σε έναν ταχύ Η/Υ (π.χ. ένα σύγχρονο Pentium).
4. Να εξηγήσετε πώς θα μπορούσατε να μετρήσετε το val με πιο αξιόπιστο τρόπο (χωρίς να αλλάξετε το περιεχόμενο της `flat`).

Απάντηση. 1) Η val μετρά το πλήθος των πράξεων α.κ.υ. ανά μονάδα χρόνου και επειδή διαιρούμε με το 1e6, έχουμε τα εκατομμύρια πράξεων α.κ.υ. ανά δευτερόλεπτο, που σημαίνει τα Mflops του αλγορίθμου.

2) Επειδή το πραγματικό διάστημα που μεσολαβεί μεταξύ της κλήσης του `tic` και του toc μπορεί να είναι μικρότερο της διακριτότητας του συστήματος α.κ.υ. και να επιστρέφεται toc=0 ή ένας αριθμός τόσο μικρός που να υπάρχει υπερχείλιση στη διαίρεση.

3) Για να αποφύγουμε το παραπάνω πρόβλημα και να μετρήσουμε αξιόπιστα τα Mflops, μπορούμε να εμφωλεύσουμε τον flat σε βρόχο, με κατάλληλα επιλεγμένο s, ως εξής:

```
tic; for j=1:s, [x,ops]=flat; end; val=s*ops/toc/1e6; end;
```

□

II. *(20 β.)*

1. Ποια είναι η «συνθήκη ακριβούς στρογγύλευσης»;
2. Να δείξετε ότι ο αλγόριθμος πολλαπλασιασμού δυο άνω τριγωνικών μητρώων $A, B \in \mathbb{R}^{2\times 2}$ είναι πίσω ευσταθής. Μπορείτε να θεωρήσετε ότι τα στοιχεία των A, B είναι α.κ.υ.
3. Έστω ότι υπολογίζετε με α.κ.υ την τιμή μιας (άγνωστης) ποσότητας x στο μοντέλο α.κ.υ. και διαπιστώνετε ότι είναι $\tilde{x}$. Έστω επίσης ότι είναι γνωστό ότι $|x-\tilde{x}|/|\tilde{x}| \leq \delta$ για κάποιο μικρό $\delta < 1$. Με βάση τα παραπάνω, να βρείτε, ως συνάρτηση του δ, ένα καλό άνω φράγμα για το σχετικό σφάλμα $|x-\tilde{x}|/|x|$.

III. *(20 β.)*

1. Να βρείτε ακριβώς ένα μητρώο μετάθεσης P για το οποίο ισχύει ότι το μητρώο $B := PA$, για οποιοδήποτε μητρώο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, έχει για στοιχεία τα $\beta_{ij} = \alpha_{n+1-i,j}$, όπου, ως συνήθως, $\alpha_{i,j}$ συμβολίζει το στοιχείο στη θέση (i, j) του A. Τότε, αν το μητρώο L είναι άνω τριγωνικό, ποια θα είναι η δομή του μητρώου $C := PLP$;

2. Με βάση τα παραπάνω, να υποδείξετε έναν τρόπο για τον υπολογισμό της παραγοντοποίησης ενός μητρώου A ως $A = UL$, όπου U, L αντίστοιχα είναι άνω και κάτω τριγωνικά και το U έχει μονάδες στη διαγώνιο. Μπορείτε να υποθέσετε ότι δεν απαιτείται οδήγηση.

3. Να χρησιμοποιήσετε την παραπάνω ιδέα (πάντα χωρίς οδήγηση) για να λύσετε το γραμμικό σύστημα $Ax = e_1$, όπου e_1 είναι το διάνυσμα $[1,0,0]^\top$ και $A = [10,-1,-1;-1,8,-1;-1,-1,5]$ ώστε να εξοικονομήσετε περίπου n^2 πράξεις κατά τη λύση σε σχέση με την κλασική LU (πρέπει να δείξετε που οφείλεται αυτή η εξοικονόμιση), όπου βέβαια στην περίπτωσή μας $n = 3$.

Απάντηση. 1) Το μητρώο P είναι το αντιδιαγώνιο μητρώο που, σε MATLAB , ορίζεται ως `P = I(n:-1:1,:)` καθώς ο πολλαπλασιασμός PA έχει ως αποτέλεσμα την ανταλλαγή των γραμμών i και n+1-j. Επομένως, για άνω τριγωνικό μητρώο L, το μητρώο PLP θα έχει κάτω τριγωνική μορφή.

2) Το μητρώο $\hat{A}; = PAP$ το οποίο θα έχει ως στοιχεία τα $\hat{\alpha}_{ij} = \alpha_{n+1-i,n+1-j}$. Όμως ισχύει επίσης ότι $P^2 = I$. Επομένως, αν χρησιμοποιήσουμε LU στο $\hat{A}$, θα έχουμε $PAP = \hat{L}\hat{U}$. επομένως $A = P\hat{L}PP\hat{U}P$ και με βάση τη δράση του P, το $U := P\hat{L}P$ είναι άνω τριγωνικό με 1 στη διαγώνιο και το $L := P\hat{L}P$ είναι άνω τριγωνικό. Επομένως ο υπολογισμός μπορεί να γίνει ως εξής (π.χ. σε MATLAB):

```
[tL,tU] = lu(P*A*P); U = P*tL*P; L = P*tU*P;
```

3) Με βάση τα παραπάνω, θα χρησιμοποιήσουμε LU επί του $PAP = [5,-1,-1;-1,8,-1;-1,-1,10]$. Στο πρώτο βήμα:

$$L_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/5 & 1 & 0 \\ 1/5 & 0 & 1 \end{pmatrix}, L_1A = \begin{pmatrix} 5 & -1 & -1 \\ 0 & \frac{39}{5} & -6/5 \\ 0 & -6/5 & \frac{49}{5} \end{pmatrix},$$

$$L_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 2/13 & 1 \end{pmatrix}, L_2(L_1A) = \begin{pmatrix} 5 & -1 & -1 \\ 0 & \frac{39}{5} & -6/5 \\ 0 & 0 & \frac{125}{13} \end{pmatrix}$$

Επίσης

$$L_1^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1/5 & 1 & 0 \\ -1/5 & 0 & 1 \end{pmatrix}, L_2^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -2/13 & 1 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1/5 & 1 & 0 \\ 1/5 & -2/13 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & -1 & -1 \\ 0 & \frac{39}{5} & -6/5 \\ 0 & 0 & \frac{125}{13} \end{pmatrix}$$

Όπως είδαμε πριν, $A = UL$ όπου

$$U := \begin{pmatrix} 1 & -2/13 & -1/5 \\ 0 & 1 & -1/5 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, L := \begin{pmatrix} \frac{125}{13} & 0 & 0 \\ -6/5 & \frac{39}{5} & 0 \\ -1 & -1 & 5 \end{pmatrix}.$$

Επομένως, λύνουμε ως εξής:

$$Ax = e_1 \to U(Lx) = e_1$$

αλλά, μετά τον υπολογισμό των παραγόντων U, L (με το συνηθισμένο κόστος της LU καθώς όλα τα στοιχεία είναι διαθέσιμα από την παραγοντοποίηση LU του PAP), το βήμα επίλυσης του $Uy = e_1$ γίνεται χωρίς πράξεις, καθώς άμεσα λαμβάνουμε ότι $y = e_1$. Αυτό, υπό κανονικές συνθήκες, θα χρειαζόταν τη λύση ενός άνω τριγωνικού συστήματος, που θα στοίχιζε n^2 πράξεις. Το επόμενο βήμα απαιτεί τη λύση του κάτω τριγωνικού συστήματος $Lx = y = e_1$ με το συνηθισμένο κόστος $O(n^2)$ σε πράξεις. Για τα παραπάνω δεδομένα, η απάντηση θα είναι

$$x = L^{-1}e_1 = [\frac{13}{125}, \frac{2}{125}, \frac{3}{125},]^\top.$$

□

V. *(20 β.)*

1. Να περιγράψετε συνοπτικά τη μέθοδο κανονικών εξισώσεων για την επίλυση του προβλήματος ελαχίστων τετραγώνων $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$, όπου $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$ και $m \geq n$. Μπορείτε να θεωρήσετε ότι οι στήλες του A είναι γραμμικά ανεξάρτητες.

   Απάντηση. (Βιβλίο) 1) Πολλαπλασιάζετε τα δυο μέλη της εξίσωσης $Ax = b$ με $A^\top$: $A^\top Ax = A^\top b$. 2) Παραγοντοποιείτε με Cholesky το $A^\top A = LL^\top$ όπου $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Αυτό γίνεται λόγω της γραμμικής αννεξαρτησίας των στηλών του A γιατί τότε το A είναι συμμετρικό θετικά ορισμένο. 3) Επιλύετε τα τριγωνικά συστήματα: $Ly = (A^\top b)$ ως προς y και το $Lx = y$ ως προς x. □

2. Να μετρήσετε το κόστος της μεθόδου σε πράξεις α.κ.υ. ως συνάρτηση των m και n (μόνον οι κυρίαρχοι όροι της πολυπλοκότητας να υπολογιστούν ακριβώς, για τους υπόλοιπους αρκεί να χρησιμοποιήσετε τάξη μεγέθους).

   Απάντηση. (Βιβλίο) Βήμα (1): $n^2/2(2m-1)$. Βήμα (2): $n^3/3$. Βήμα (3): $2n^2$. Συνολικά: $mn^2 + n^3/3 + O(n^2)$. □

3. Χρησιμοποιώντας ένα παράδειγμα με συγκεκριμένο A να δείξετε ότι η μέθοδος μπορεί να δώσει μη ικανοποιητικά αριθμητικά αποτελέσματα.

   Απάντηση. (Βιβλίο) Δείτε για παράδειγμα το μητρώο $A = [1+\delta, 1; 1, 1]$ όπου $\delta^2 < \varepsilon$ της μηχανής, οπότε $A^\top A = [1, 1; 1, 1]$ που είναι μη αντιστρέψιμο. □

IV. *(20 β.)*

Έστω η συνήθης διαφορική εξίσωση (ΣΔΕ) $\frac{du}{dt}(t) = -Au(t)$ όπου $A = [3/2, -1; -1, 3/2]$, $u = [u_1(t), u_2(t)]^\top$ και οι συναρτήσεις u_1, u_2 είναι επιλεγμένες ώστε $u_1(0) = 2$, $u_2(0) = 1$.

1. Να χρησιμοποιήσετε την εμπρός Euler με σταθερό βήμα διακριτοποίησης $h = 2$ για να υπολογίσετε την αριθμητική προσέγγιση της λύσης στο χρονικό σημείο $t = 6$.

   Απάντηση. στην εμπρός Euler η παραπάνω ΣΔΕ προσεγγίζεται ως $(U^{(j+1)} - U^{(j)})/h = -AU^{(j)}$. Επομένως ισχύει $U^{(j+1)} = (I - Ah)U^{(j)}$ όπου συμβολίζουμε με $U^{(j)}$ την προσέγγιση της τιμής του

$u(t_j) = u(t_0 + jh)$ μέσω της μεθόδου (που μπορεί να είναι αξιόπιστη ή όχι). Σε αριθμητική άπειρης ακρίβειας έχουμε ότι $U \in \mathbb{R}^2$. Επομένως

$$\begin{pmatrix} U_1^{(j+1)} \\ U_2^{(j+1)} \end{pmatrix} = (I - Ah)U^{(j)} = \begin{pmatrix} U_1^{(j)} \\ U_2^{(j)} \end{pmatrix} - h \begin{pmatrix} 3/2 & -1 \\ -1 & 3/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{(j)} \\ U_2^{(j)} \end{pmatrix}$$

Με βάση το παραπάνω υπολογίζουμε τη λύση στα βήματα $t = 2,4,6$ εκκινώντας από το 0:

$$\begin{pmatrix} U_1^{(j+1)} \\ U_2^{(j+1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-h3/2 & h \\ h & 1-h3/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{(j)} \\ U_2^{(j)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -2 & 2 \\ 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^{(j)} \\ U_2^{(j)} \end{pmatrix}$$

και κάνοντας τις πράξεις προκύπτουν οι τιμές:

$$U^{(2)} = [-2,2]^\top, U^{(4)} = [8,-8]^\top, U^{(6)} = [-32,32]^\top.$$

□

2. Είναι γνωστό ότι η ακριβής λύση του παραπάνω συστήματος των ΣΔΕ τείνει στο 0 καθώς το $t \to \infty$. Με βάση αυτό το στοιχείο, να σχολιάσετε τη συμπεριφορά της παραπάνω προσέγγισης. (Υπόδειξη: Για μια πλήρη εξήγηση, είναι χρήσιμο να υπολογίσετε τις ιδιοτιμές του A.)

   Απάντηση. Παρατηρούμε ότι οι τιμές αυξάνουν (και θα συνεχίσουν να αυξάνουν) Αυτό είναι αντίθετο με ό,τι προβλέπεται για τη λύση της ΣΔΕ. (Προσέξτε επίσης από τα πρόσημα ότι έχουμε και ταλάντωση, που επίσης δεν συμβαίνει στη λύση της ΣΔΕ). Ο λόγος της αστάθειας εξηγείται ως εξής: Για να τείνει στο 0 η λύση θα πρέπει η απόλυτες τιμές των ιδιοτιμών του μητρώου να είναι μικρότερες του 1, δηλ. η φασματική ακτίνα του μητρώου να είναι φραγμένη αυστηρά από το 1. Οι ιδιοτιμές του μητρώου $I - hA$ θα είναι $1 - h\lambda(A)$ όπου με $\lambda(A)$ συμβολίζουμε τις ιδιοτιμές του A. Σημειώστε ότι είναι προτιμότερο να εξετάσουμε τις ιδιοτιμές ως συνάρτηση του h γιατί βοηθά και στην επιλογή βήματος με το οποίο δεν θα υπάρχει αστάθεια. Έχουμε επομένως ότι θα πρέπει $|1 - h\lambda(A)| < 1$ και επειδή οι ιδιοτιμές είναι πραγματικές (συμμετρικό μητρώο) θα πρέπει να έχουμε $2 > h/\lambda(A) > 0$. Επομένως το βήμα διακριτοποίησης πρέπει να ικανοποιεί $h < 2\lambda$. Για το συγκεκριμένο A οι ιδιοτιμές υπολογίζονται εύκολα (λύσεις του $(3/2 - \lambda)^2 - 1 = 0 \Rightarrow \lambda_1 = 1/2, \lambda_2 = 5/2$ επομένως θα πρέπει $h < 1$. □

3. Να εξηγήσετε με συντομία έναν τρόπο με τον οποίο θα μπορούσατε να υπολογίσετε τη λύση πιο αξιόπιστα.

   Απάντηση. Θα μπορούσαμε να χρησιμοποιήσουμε πίσω Euler ή να αλλάξουμε το βήμα h ώστε να ικανοποιούνται οι ανισότητες, δηλ. λαμβάνοντας h τέτοιο ώστε $h < 1$. □