ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι (22 Σεπτεμβρίου) ΕΠΙΛΕΓΜΕΝΕΣ ΑΠΑΝΤΗΣΕΙΣ

1ο ΘΕΜΑ 1. Αφού ορίσετε ακριβώς τι σημαίνει πίσω ευσταθής υπολογισμός, να εξηγήσετε αν ο υπολογισμός του εσωτερικού γινομένου δύο διανυσμάτων α.κ.υ. με τον συνηθισμένο τρόπο άθροισης (από αριστερά προς δεξιά) των γινομένων των αντίστοιχων στοιχείων των διανυσμάτων είναι πίσω ευσταθής.

Απάντηση. ΒΙΒΛΙΟ □

2. Σωστό ή Λάθος : Αν το μητρώο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι τριδιαγώνιο και αντιστρέψιμο τότε πάντα ισχύει ότι η παραγοντοποίηση με LU με μερική οδήγηση (π.χ. το αποτέλεσμα της εντολής MATLAB $[\mathtt{L},\mathtt{U}] = \mathtt{lu}(\mathtt{A})$), υπολογίζει ένα κάτω διδιαγώνιο μητρώο L με μονάδες στη διαγώνιο και ένα άνω διδιαγώνιο μητρώο τέτοια ώστε $A = LU$.

Απάντηση. ΛΑΘΟΣ : Γνωρίζουμε ότι αν ένα μητρώο είναι αντιστρέψιμο τότε υπάρχουν μητρώα L, U κάτω και άνω τριγωνικά αντίστοιχα και με το L με μονάδες στη διαγώνιο, και μητρώο μετάθεσης P τέτοια ώστε $PA = LU$. Αν το A είναι τριδιαγώνιο τότε η παραπάνω κλήση στη MATLAB έχει ως αποτέλεσμα ένα άνω τριγωνικό U και ένα μητρώο που ενσωματώνει την πληροφορία που περιέχουν το P και το L (δηλ. $P^\top L$ που η MATLAB καλεί «ψυχολογικά κάτω τριγωνικό»). Ένα ακραίο (κλασικό) παράδειγμα είναι το $A = [0, 1; 1, 0]$ για το οποίο η lu επιστρέφει $U = I$ αλλά $L = A$ που προφανώς δεν είναι κάτω τριγωνικό. □

3. Αν ένα μητρώο έχει δείκτη κατάστασης 10^6 και η υπολογισμένη λύση σε σύστημα α.κ.υ. IEEE διπλής ακρίβειας (μονάδα στρογγύλευσης $\mathbf{u} \approx 10^{-16}$) του συστήματος $Ax = b$ με QR είναι $\hat{x}$ τότε $\frac{\|x-\hat{x}\|}{\|x\|} \leq 10^{-\rho}$. Ποιά είναι η τιμή του ρ και γιατί (σύντομη εξήγηση).

Απάντηση. Χονδρικά το εμπρός σφάλμα φράσσεται από πάνω από το δείκτη κατάστασης του προβλήματος επί το πίσω σφάλμα. Η QR είναι πίσω ευσταθής επομένως το πίσω σφάλμα είναι $O(\mathbf{u})$. Άρα μπορούμε να πούμε ότι το εμπρός σφάλμα φράσσεται εκ των άνω από $10^6 \times 10^{-16}$ επομένως $\rho = 10$. ΕΠΙΣΗΣ (για άλλες εκδοχές): Αντίστοιχα αποτελέσματα έχουμε αν το μητρώο επιδέχεται την εφαρμογή αλγορίθμων που είναι πίσω ευσταθείς, π.χ. συστήματα με ΣΘΟ μητρώα μέσω της Cholesky. □

4. Για ένα πολυώνυμο p μιας μεταβλητής x δίνονται οι συντελεστές της δυναμομορφής του, $a = [a(1); a(2); ...; a(n + 1)]$, και όπως συνηθίζεται στη MATLAB, $a(1)$ είναι ο συντελεστής της μεγαλύτερης δύναμης (n-οστής), ... και $a(n + 1)$ ο τελευταίος όρος (συντελεστής του $x^0 = 1$). Δίνονται επίσης και m τιμές της μεταβλητής σε διάνυσμα $X = [x(1); x(2); ...; x(m)]$. α) Να εκφράσετε τον υπολογισμό των τιμών $\{p(x(1)), ..., p(x(m))\}$ χρησιμοποιώντας μια πράξη πολλαπλασιασμού μητρώου με διάνυσμα και τις απαραίτητες αρχικοποιήσεις για το μητρώο και το διάνυσμα. Καλύτερες απαντήσεις θα κρίνονται εκείνες που είναι άμεσα εκτελέσιμες σε MATLAB και που αποφεύγουν τη χρήση διπλά εμφωλευμένου βρόχου χρησιμοποιώντας τις κατάλληλες εκφράσεις. β) Για ποιό λόγο, όταν το n είναι μεγάλο, αυτή η μέθοδος υπολογισμού είναι ανεπιθύμητη.

Απάντηση. (α) Ένας τρόπος είναι να εκφράσουμε τον υπολογισμό

$$P = [X.\hat{}0, X, ..., X.\hat{}(n-1), X.\hat{}n] * a(n + 1 : -1 : 1)$$

όπου P είναι η στήλη των $p(x(1 : n))$. π.χ. με το βρόχο

$V = [];$
for $j = 0 : n$
  $V = [V, X.\hat{}j];$
end
$P = V * a(n+1 : -1 : 1);$

(β) Γιατί βασίζονται σε μητρώα Vandermonde που έχουν πολύ μεγάλο δείκτη κατάστασης ως προς τον πολλαπλασιασμό και άρα μπορεί να έχουμε μεγάλη μεγέθυνση των σφαλμάτων.

□

- Σωστό ή Λάθος : Αν το μητρώο A είναι συμμετρικό θετικά ορισμένο και τριδιαγώνιο τότε πάντα ισχύει ότι η παραγοντοποίηση με LU με μερική οδήγηση (π.χ. το αποτέλεσμα της εντολής MATLAB $[\mathtt{L},\mathtt{U}] = \mathtt{lu(A)}$), υπολογίζει ένα κάτω διδιαγώνιο μητρώο L με μονάδες στη διαγώνιο και ένα άνω διδιαγώνιο μητρώο τέτοια ώστε $A = LU$.

  Απάντηση. ΣΩΣΤΟ : Το μητρώο είναι ΣΘΟ επομένως δεν χρειάζεται οδήγηση (αν γίνει μερική οδήγηση, οι οδηγοί είναι πάντα τα διαγώνια στοιχεία). Σε κάθε βήμα, $j = 1, ..., n-1$, για την απαλοιφή του μοναδικού μη μηδενικού υποδιαγώνιου στοιχείου, χρησιμοποιούμε τη γραμμή με μη μηδενικά στοιχεία στις θέσεις $(j,j),(j,j+1)$ επομένως αυτό έχει ως αποτέλεσμα το μηδενισμό του στοιχείου στη θέση $(j+1,j)$ και την αλλαγή του στοιχείου στη θέση $(j+1,j+1)$. Τα υπόλοιπα στοιχεία παραμένουν άθικτα. Επομένως το U είναι διδιαγώνιο (περιέχει στη διαγώνιο τους οδηγούς και στην υπερδιαγώνιο την υπερδιαγώνιο του A ενώ όλα τα άλλα στοιχεία είναι 0.) Για το L προσέξτε ότι σε κάθε βήμα εφαρμόζουμε το στοιχειώδες μητρώο Gauss $L_j = I - u_j e_1^\top$ όπου u_j είναι διάνυσμα με μοναδικό μη μηδενικό στοιχείο στη θέση $j+1$ λόγω της τριδιαγώνιας μορφής του A και e_j το j διάνυσμα της τυπικής βάσης. Τότε το L θα είναι $I + u_1 e_1^\top + \cdots u_{n-1} e_{n-1}^\top$ που είναι κάτω διδιαγώνιο.
  □

- Σωστό ή Λάθος : Αν το μητρώο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι κάτω τριγωνικό με μονάδες στη διαγώνιο τότε πάντα ισχύει ότι η παραγοντοποίηση με LU με μερική οδήγηση (π.χ. το αποτέλεσμα της εντολής MATLAB $[\mathtt{L},\mathtt{U}] = \mathtt{lu(A)}$) επιστρέφει ως L το A και ως U το ταυτοτικό μητρώο της κατάλληλης διάστασης.

  Απάντηση. Γενικά ΛΑΘΟΣ γιατί με τη μερική οδήγηση, μπορεί να μην προκύψει κάτω τριγωνικό μητρώο. Για παράδειγμα $A = [1,0;2,1]$ στη MATLAB επιστρέφει $L = [1/2,1;1,0]$. Θα ίσχυε αν η απόλυτη τιμή κάθε στοιχείου του A εκτός διαγωνίου ήταν μικρότερο του 1.
  □

- Σωστό ή Λάθος : Αν το μητρώο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ είναι άνω τριγωνικό χωρίς μηδενικά στη διαγώνιο τότε πάντα ισχύει ότι η παραγοντοποίηση με LU με μερική οδήγηση (π.χ. το αποτέλεσμα της εντολής MATLAB $[\mathtt{L},\mathtt{U}] = \mathtt{lu(A)}$) υπολογίζει ως $L = I$ (ταυτοτικό) και ως $U = A$.

  Απάντηση. ΣΩΣΤΟ : Κατά τη διάρκεια της οδήγησης τα διαγώνια στοιχεία είναι πάντα μεγαλύτερα του 0 επομένως οι οδηγοί είναι πάντα τα διαγώνια στοιχεία. Επιπλέον δεν χρειάζεται να γίνει απαλοιφή των κάτω τριγωνικών στοιχείων καθώς είναι όλα 0. Επομένως η παραγοντοποίηση LU συνίσταται απλά στο $A = I \cdot A$. □

- Υπενθυμίζουμε ότι στη MATLAB, οι μεταβλητές `realmax, realmin, eps` περιέχουν αντίστοιχα το μέγιστο και ελάχιστο κανονικοποιημένο α.κ.υ. και το έψιλον της μηχανής. Τι επιστρέφουν οι παρακάτω εκφράσεις :

  i) `1+ eps/2 + eps∧2/2 == 1`. *ii)* `realmin/0`.
  iii) `realmin/2 == 0`. *iv)* `realmax+realmax/2`. *v)* 0/0.

2ο ΘΕΜΑ Έστω $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, και τα τυχαία (μη μηδενικά) διανύσματα (στήλες) $p, x_i \in \mathbb{R}^n$ για $i = 1, ..., s$ και ο υπολογισμός

for $i = 1 : s$

$\quad y_i = p + Ax_i;$

end

1. Να βρείτε τον ελάχιστο αριθμό μεταφορών ανά πράξη α.κ.υ. για τον υπολογισμό ως έχει χρησιμοποιώντας το γνωστό (από το βιβλίο) απλό υπολογιστικό μοντέλο.
2. Να τροποποιήσετε τον παραπάνω κώδικα και να τον εκφράσετε σαν μια πράξη BLAS-3 και ό,τι επιπλέον αρχικοποιήσεις χρειάζονται.

Απάντηση.

1. Υπολογίζουμε τα Ω, $\Phi_{\min}$ για να βρούμε το ζητούμενο $\mu_{\min} = \Phi_{\min}/\Omega$. Έχουμε $\Phi_{\min} = n^2 + n + 2ns$ και $\Omega = 2n^2 s$ άρα
$$\mu_{\min} = \frac{n^2+n+2ns}{2n^2 s} = \frac{1}{2s} + \frac{1}{n} + \frac{1}{2ns}$$
Προσοχή: Τα p, A μεταφέρονται μόνο μια φορά!
2. Προφανώς, τα $Y = [y_1, ..., y_s]$, $X = [x_1, ..., x_s]$ είναι $n \times s$. Αν $P = [p, ..., p]$ είναι $n \times s$ τότε $Y = P + AX$ δηλαδή πράξη BLAS-3. Αρχικοποιούμε δηλαδή τα Y, X με τις στήλες y_i, x_i ενώ το $P = pe^\top$ όπου $e \in \mathbb{R}^s$ είναι περιέχει μόνο μονάδες.

□

Έστω πυκνό αντιστρέψιμο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, και τα τυχαία (μη μηδενικά) διανύσματα (στήλες) $x_i, z_i \in \mathbb{R}^n$ για $i = 1, ..., s$ και ο υπολογισμός

for $i = 1 : s$

$\quad z_i = z_i + A\backslash x_i;$

end

όπου ο τελεστής «\» ενεργεί όπως και στη MATLAB.

1. Να εξηγήσετε γιατί το κυρίαρχο κόστος του είναι $O(sn^3)$ και να υπολογίσετε τον ελάχιστον αριθμό μεταφορών στο γνωστό (από το βιβλίο) απλό υπολογιστικό μοντέλο.
2. Να τροποποιήσετε τον κώδικα έτσι ώστε τα ίδια αποτελέσματα να υπολογίζονται με κυρίαρχο κόστος $O(n^3)$ (δηλ. χωρίς τον παράγοντα s).

Απάντηση.

1. Το \ συμβολίζει επίλυση συστήματος στη MATLAB (ευρέως γνωστό από την πρώτη άσκηση). Η επίλυση γενικού συστήματος $n \times n$ χρειάζεται $\Omega = 2/3n^3 + O(n^2)$. Επομένως, η κυρίαρχη πολυπλοκότητα στο βρόχο είναι οι s λύσεις με το A, επομένως $O(sn^3)$. Επίσης $\Phi_{\min} = n^2 + 3ns$ Προσοχή: Το A μεταφέρεται μόνο μια φορά!
2. Παρατηρούμε ότι χρησιμοποιούμε το ίδιο μητρώο A κάθε φορά. Επομένως μπορούμε να εφαρμόσουμε LU μόνο μια φορά εκτός του βρόχου και να χρησιμοποιήσουμε τα προκύπτοντα L, U στίς λύσεις, π.χ.

   $[L, U] = \texttt{lu}(A);$

   for $i = 1 : s$

   $\quad z_i = z_i + U\backslash(L\backslash x_i);$

   end

   Το κόστος εκτός βρόχου είναι $2/3n^3 + O(n^2)$ ενώ εντός βρόχου $O(sn^2)$ επομένως συνολικά έχουμε κυρίαρχο κόστος $O(n^3)$ (υποθέτουμε ότι $s \ll n$.)

□

- Έστω τα s μητρώα $A_i \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $i = 1, ..., s$, το μη μηδενικό διάνυσμα p και ο υπολογισμός (I είναι ταυτοτικό μητρώο)

  $B = I;$
  for $i = 1 : s;$
  $\quad B = A_i * B;$
  end;
  $y = B * p;$

  1. Ο αριθμός πράξεων α.κ.υ. (δηλ. το Ω στο γνωστό - από το βιβλίο - υπολογιστικό μοντέλο) είναι $O(sn^3)$. Να βρείτε τον ακριβή τύπο για το Ω και να αναφέρετε την κατηγορία BLAS των παραπάνω πράξεων.
  2. Να τροποποιήσετε τον παραπάνω κώδικα έτσι ώστε το συνολικό κόστος να είναι $O(sn^2)$, να υπολογίσετε το ακριβές Ω.

  Απάντηση.

  1. Όπως το γράψαμε πρόκειται για s πολλαπλασιασμούς μητρώων (BLAS-3) και στη συνέχεια πολλαπλασιασμός του γινομένου μητρώου με το διάνυσμα p (BLAS-2). Το κόστος κάθε πολλαπλασιασμού μητρώων είναι $n^2(2n-1)$ επομένως συνολικά θα έχουμε $(s-1)n^2(2n-1)$ ή $sn^2(2n-1)$ (το δεύτερο ισχύει αν δεν λάβουμε υπόψη ότι δεν χρειάζεται ο πρώτος πολλαπλασιασμός με το ταυτοτικό, δηλ. το $A_1 \cdot I$). Ο πολλαπλασιασμός του γινομένου με το διάνυσμα προσθέτει $n(2n-1)$ επιπλέον πράξεις. Επομένως $\Omega = (s-\delta)n^2(2n-1) + n(2n-1) = n(2n-1)((s-\delta)n+1)$ όπου $\delta = 0$ ή 1.
  2. Καλύτερος τρόπος υπολογισμού είναι $y = A_s(A_{s-1}(\cdots(A_1 p)\cdots)$ δηλαδή με τον κώδικα

     $y = p;$
     for $i = 1 : s;$
     $\quad y = A_i * y;$
     end

     Εδώ $\Omega = sn(2n-1)$.

□

3ο ΘΕΜΑ Έστω η συνάρτηση $u : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ που ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση

$$-\frac{d^2u}{dx^2}(x) + (\mu+2)xu(x) = x^2, \text{ για κάθε } x \in [0,1],$$

με συνοριακές συνθήκες $u(0) = 1, u(1) = 0$.

1. Να διακριτοποιήσετε το πρόβλημα χρησιμοποιώντας πλέγμα $n = 4$ ισαπεχόντων εσωτερικών σημείων και κεντρισμένες πεπερασμένες διαφορές 2ης τάξης και να γράψετε το αλγεβρικό σύστημα που προκύπτει ως $Ab = c$. Πρέπει να γράψετε ακριβώς τις αριθμητικές τιμές των στοιχείων των A, c.

   Απάντηση. Θέτουμε $h = 1/(n+1) = 1/5$ και διακριτοποιούμε χρησιμοποιώντας πλέγμα με κόμβους $0, 1/5, 2/5, 3/5, 4/5, 1$, το διάνυσμα $U = [U_1, U_2, U_3, U_4]^\top$ όπου U_j θα χρησιμοποιηθεί ως προσέγγιση του $u(x_j)$. Χρησιμοποιούμε τους γνωστούς τύπους για την προσέγγιση των παραγώνγων, στην περίπτωσή μας

$$u''(x_j) \approx \frac{U_{j+1} - 2U_j + U_{j-1}}{h^2}$$

και αντικαθιστούμε στη διαφορική χρησιμοποιώντας επίσης τις συνοριακές τιμές $u(0) = 1, u(1) = 0$. Αν π.χ. $\mu = 0$, προκύπτει ένα τριδιαγώνιο σύστημα 4×4

$$\begin{pmatrix} \frac{252}{5} & -25 & & \\ -25 & \frac{254}{5} & -25 & \\ & -25 & \frac{256}{5} & -25 \\ & & -25 & \frac{258}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1 \\ U_2 \\ U_3 \\ U_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{626}{25} \\ \frac{4}{25} \\ \frac{9}{25} \\ \frac{16}{25} \end{pmatrix} \quad \Box$$

2. Ποιά είναι μια ελάχιστη συνθηκη που πρέπει να ικανοποιεί η άγνωστη συνάρτηση u για να επιτρέπει το σφάλμα διακριτοποίησης να είναι 2ης τάξης (ως προς την απόσταση των διαδοχικών σημείων του πλέγματος).
   Απάντηση. Να είναι η 4η παράγωγος συνεχής (και άρα φραγμένη) στο κλειστό διάστημα $[0, 1]$. Προκύπτει γιατί το σφάλμα διακριτοποίησης σε κάθε κόμβο του πλέγματος είναι ανάλογο του $h^2 u^{(IV)}(\hat{x}_j)$ για $\hat{x}_j$ κοντά στο x_j. Επομένως για διακριτοποίηση 2ης τάξης πρέπει να εξασφαλίζεται ότι η 4η παράγωγος είναι φραγμένη. $\Box$

3. Αν χρησιμοποιούσαμε n κόμβους, τότε το κόστος επίλυσης του γραμμικού συστήματος θα ήταν $O(n^\kappa)$. Ποιό θα είναι το κ και γιατί;
   Απάντηση. Επειδή το μητρώο είναι τριδιαγώνιο, το κόστος επίλυσης είναι $O(n)$, δηλ. $\kappa = 1$.
   ΠΡΟΣΟΧΗ: Υπάρχουν εκδοχές των ερωτήσεων με διαφορική εξίσωση του τύπου

$$-\frac{d^2u}{dx^2}(x) + (\mu + 4)\frac{du}{dx}(x) + u(x) = 1, \text{ για κάθε } x \in [0, 1],$$

   και ερωτάστε αν μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε παραγοντοποίηση Cholesky για την επίλυση. Η απάντηση είναι ότι όχι γιατί το (τριδιαγώνιο) μητρώο που προκύπτει δεν είναι συμμετρικό. $\Box$

4. Για τη διαφορική εξίσωση (αρχικών τιμών) $\frac{dv}{dt}(t) = Bv(t)$ όπου $B = -[102-\mu, -1; -1, 102-\mu]$, $v = [v_1(t), v_2(t)]^\top$ να υπολογίσετε πόσα τουλάχιστον βήματα «εμπρός Euler» πρέπει να εκτελεστούν για να υπολογιστεί η λύση στο $t = 4$ χωρίς να παρουσιάζεται αστάθεια.
   Απάντηση. Στην εμπρός Euler

$$V^{(j+1)} - V^{(j)} = \Delta t B V^{(j)}$$

   όπου $V^{(j)}$ είναι η προσέγγιση του $v(t_j)$. Επομένως

$$V^{(j+1)} - V^{(j)} = \Delta t B V^{(j)}$$

   και άρα

$$V^{(j+1)} = (I + \Delta t B)V^{(j)}$$

   άρα θέλουμε το Δt να επιλεγεί έτσι ώστε οι ιδιοτιμές του $(I + \Delta t B)$ να είναι κατά μέγιστο 1. Επομένως θέλουμε Δt τέτοιο ώστε $\Delta t \leq \min \frac{2}{-\lambda_j}$. Αν π.χ. $\mu = 0$ υπολογίζουμε τις ιδιοτιμές του B και τις βρίσκουμε $\lambda = \{-101, -103\}$ επομένως θέτουμε $\Delta t = \frac{2}{103}$ επομένως θα χρειαστούν τουλάχιστον $\frac{4}{2} \times 103 = 206$ βήματα. $\Box$