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

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ **I** (Φεβρουάριος 2002)

Διαβάστε προσεκτικά τις εκφωνήσεις. Για την πλήρη αξιολόγηση του γραπτού σας πρέπει να παρουσιάσετε όλο σας τον συλλογισμό και όλα τα ενδιάμεσα αποτελέσματα. Έχετε 3 ώρες. Οι αλγόριθμοι πρέπει να περιγράφονται με σαφήνεια, π.χ. όπως στις σημειώσεις ή με *MATLAB* . Επιτρέπονται εντολές που αντιστοιχούν σε πράξεις τύπου *BLAS-1, 2* αλλά όχι εντολές που αντιστοιχούν σε πράξεις υψηλού επιπέδου, π.χ. `A\b`

ΑΠΑΝΤΗΣΕΙΣ

I. (30 β.) Να απαντήσετε σύντομα και περιεκτικά στα παρακάτω ερωτήματα (στις ερωτήσεις Σωστό/Λάθος πρέπει να δικαιολογήσετε τις απαντήσεις για να βαθμολογηθείτε).

1) Σωστό ή Λάθος: Ο δείκτης κατάστασης ενός γενικού μητρείου ως προς την ευκλείδια νόρμα είναι άμεσα υπολογίσιμος από τις ιδιοτιμές του μητρείου.

Επίλυση. Λάθος. Ο δείκτης κατάστασης $\kappa_2(A) := \frac{\sigma_{\max}(A)}{\sigma_{\min}(A)}$, όπου $\sigma_{\min}(A), \sigma_{\max}(A)$ είναι αντίστοιχα η ελάχιστη και μέγιστη ιδιοτιμή του A. Επομένως η πρόταση είναι σωστή μόνον όταν το μητρείο είναι συμμετρικό. □

2) Σωστό ή Λάθος: Η επίλυση τριγωνικών συστημάτων με πολλά δεξιά μέλη παρουσιάζει καλή τοπικότητα και ανήκει στην κατηγορία BLAS-3.

Επίλυση. Σωστό (βιβλίο, τέλος ενότητας 5.4.2). □

3) Με το πέρας της παραγοντοποίησης LU ενός μητρείου με μερική οδήγηση, οπότε επιστρέφονται στην έξοδο τα μητρώα L και U και το διάνυσμα μεταθέσεων P, είναι οι οδηγοί άμεσα διαθέσιμοι στην έξοδο;

Επίλυση. Ναι. Οι οδηγοί βρίσκονται στη διαγώνιο του U. □

4) Έστω κάτω τριγωνικά $A, B \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Να γράψετε αλγόριθμο για τον πολλαπλασιασμό AB που να εκμεταλλεύεται τη μηδενική δομή των μητρείων και να υπολογίσετε ακριβώς (δηλ. όχι απλώς σαν τάξη μεγέθους) τον πιο σημαντικό όρο του κόστους σε πράξεις α.κ.υ.

Επίλυση.

□

5) Κατά τη δεκαετία του 60, πολύ πριν την εισαγωγή του προτύπου α.κ.υ. IEEE, μερικά συστήματα α.κ.υ., όταν συναντούσαν δαίρεση ενός μη μηδενικού αριθμού με το 0, έθεταν ως αποτέλεσμα το μέγιστο αριθμό που μπορούσε να αναπαραστήσει το σύστημα. Διαβάζουμε σε ένα πρόσφατο βιβλίο ότι 'Η μέθοδος αυτή είχε ένα σοβαρό πρόβλημα, π.χ. στον υπολογισμό εκφράσεων όπως $p = 1/x - 1/y$'. Περιγράψτε με μεγαλύτερη λεπτομέρεια τι πρόβλημα ήταν αυτό και πώς λύθηκε με το πρότυπο IEEE.

Επίλυση. Το πρόβλημα ήταν ότι για $x = y = 0$ η παραπάνω έκφραση έδινε $p = 0$, που δεν έχει νόημα. Στην αριθμητική IEEE, το παραπάνω δίνει `NaN` που είναι το `Inf` − `Inf` □

II. (30 β.)

1. Να υπολογίσετε τον ελάχιστο αριθμό μεταφορών ανά πράξη α.κ.υ. για το sAXPY.

2. Να υπολογίσετε ένα όσο δυνατόν καλύτερο άνω φράγμα για το δείκτη κατάστασης της πράξης.

3. Να δείξετε ότι η πράξη είναι πίσω ευσταθής.

Επίλυση. Αποτελείται από 2 βήματα. 1) την εύρεση του δείκτη κατάστασης, 2) την εύρεση του πίσω σφάλματος. Το άνω φράγμα για το εμπρός σφάλμα θα είναι το γινόμενο των 1 και 2.

$$\begin{aligned}
\mathrm{fl}(\zeta_i) &= \mathrm{fl}(\eta_i + \mathrm{fl}(\alpha \cdot \xi_i)) \\
&= (\eta_i + \alpha\xi_i(1+\delta_{1,i}))(1+\delta_{2,i}) \\
&= \eta_i(1+\delta_{2,i}) + \alpha\xi_i(1+\delta_{1,i})(1+\delta_{2,i}) \\
&= \eta_i(1+\delta_{2,i}) + \alpha\xi_i(1+\theta_{2,i}),
\end{aligned}$$

όπου $|\delta_{i,j}| \le 1$ και $|\theta_{2,i}| \le \gamma_2 = \frac{2u}{1-2u}$. επομένως, το φράγμα που έχουμε για το απόλυτο σφάλμα μέσω εμπρός ανάλυσης είναι

$$\begin{aligned}
|\zeta_i - \tilde{\zeta_i}| &= |\delta_{1,i}\eta_i + \theta_i 2, i\xi_i| \\
&\le u|\eta_i| + \gamma_2|\xi_i| \\
&\le u|\eta_i| + 2u|\xi_i| + O(u^2) \\
|z - \tilde{z}| &\le u(|y| + 2|x|) + O(u^2)
\end{aligned}$$

Φράξαμε το «απόλυτο εμπρός σφάλμα». Αν γράφουμε

$$\tilde{y} = \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \delta_{2,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \delta_{2,2} & \cdots & \vdots \\ \ddots & \cdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \delta_{2,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \eta_2 \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix}$$

$$\tilde{x} = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \theta_{2,1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \theta_{2,2} & \cdots & \vdots \\ \ddots & \cdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \theta_{2,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix}$$

τότε

$$\tilde{z} = z + \Delta y + \alpha\Theta x$$

$$\|\tilde{z} - z\| \le \|\Delta\|\|y\| + \|\Theta\|\|\alpha x\|$$

<u>Παρατήρηση:</u> Οι Δ, Θ είναι διαγώνιοι με τα διαγώνια στοιχεία τους φραγμένο από u και γ_2 αντίστοιχα. Τότε

$$\|\Delta\| \le u, \|\Theta\| \le \gamma_2$$

για οποιαδήποτε από τις γνωστές νόρμες. Επομένως

$$\|\tilde{z} - z\| \le u\|y\| + 2u\|x\| + O(u^2)$$

$$\mathrm{cond}(f; X) = \frac{\|f'(X)\|}{\|z\|}\|X\|$$

όπου

$$X = [x; y; \alpha] \in \mathbb{R}^{2n+1},\ f^{'}(X) = [\alpha I, I, x] \in \mathbb{R}^{n\times(2n+1)}$$

αλλά

$$\|f^{'}(X)\|_\infty = \max_j\{1 + |\alpha| + |\xi_j|\} = 1 + |\alpha| + \|x\|_\infty$$

$$\|X\|_\infty = \max\{\|x\|_\infty, \|y\|_\infty, |\alpha|\}$$

$$fl(z) = \tilde{y} + \alpha\tilde{x}$$

Το αποτέλεσμα είναι το ακριβές sAXPY επί των

$$[\tilde{y}; \tilde{x}] = [\tilde{\eta}_1, \cdots, \tilde{\eta}_n; \tilde{\xi}_1, \cdots, \tilde{\xi}_n]$$

όπου

$$\frac{|\eta_i - \tilde{\eta}_i|}{|\eta_i|} = |\delta_{1,i}| \leq u, \frac{|\xi_i - \tilde{\xi}_i|}{|\xi_i|} = |\gamma_2| \leq 2u + O(u^2)$$

$$\Downarrow$$

Πίσω ευστάθεια $\Rightarrow$ το εμπρός σφάλμα εξαρτάται από το δείκτη κατάστασης

□

III. (40 β. +*bonus 10*) Έστω η συνάρτηση $u : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ και έστω ότι, στο διάστημα $[1, 2]$, όλες οιπαράγωγοι μέχρι και την 4η, $u^{(4)}(x)$, υπάρχουν και είναι συνεχείς. Έστω επίσης, ότι, η u ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση

$$(1 + x^2)u^{(2)} - 6xu = x, x \in (1, 2)$$

και τις συνοριακές συνθήκες $u(1) = 1, u(2) = 2$. Θέλουμε να προσεγγίσουμε τη λύση αριθμητικά, χρησιμοποιώντας κεντρισμένες πεπερασμένες διαφορές δεύτερης τάξης.

1. Να διακριτοποιήσετε την εξίσωση και να γράψετε το γραμμικό σύστημα που προκύπτει για πλέγμα αποτελούμενο από $n = 5$ ισαπέχοντες κόμβους στο διάστημα $(1, 2)$ (οι κόμβοι είναι όλοι εσωτερικοί).

2. Έστω τώρα ότι πρέπει να λύσουμε το ίδιο πρόβλημα για κάποιο μεγάλο n και ότι έχετε κατασκευάσει σύστημα, αντίστοιχο με το παραπάνω. Να αναφέρετε τον πιο φθηνό και μπροστά ευσταθή αλγόριθμο επίλυσης που γνωρίζετε ότι μπορεί (και πρέπει) να χρησιμοποιηθεί για να υπολογιστεί η λύση και να δικαιολογήσετε πλήρως την επιλογή σας.

3. (Ερώτηση BONUS:) Να εκτιμήσετε ένα άνω φράγμα για το δείκτη κατάστασης του μητρείου των συντελεστών στην περίπτωση που $n = 5$.

Επίλυση. Το πρόβλημα αυτό αποτελεί μία απλή περίπτωση της θεωρίας που αναπτύξαμε στο κεφάλαιο 8.2.1. 1) Χρησιμοποιούμε κεντρισμένες πεπερασμένες διαφορές οπότε η προσέγγιση της δευτέρας παραγώγου σε κάθε σημείο του πλέγματος $x_i \in (-1, 1)$ έχει τη μορφή

$$u^{(2)}(x_i) \approx \frac{U_{i+1} - 2U_i + U_{i-1}}{h^2}$$

όπου U_i είναι η συνάρτηση πλέγματος που θα χρησιμοποιήσουμε για να προσεγγίσουμε την άγνωστη συνάρτηση u. Η διακριτοποίηση της εξίσωσης $(1+x^2)u^{(2)} - 6xu = x$, σε κάθε σημείο οδηγεί στις διακριτές εξισώσεις

$$\begin{aligned}
(1+x_i^2)\frac{U_{i+1}-2U_i+U_{i-1}}{h^2} - 6x_iU_i &= x_i \Rightarrow \\
\frac{-U_{i+1}+(2(1+x_i^2)+6x_ih^2)U_i - U_{i-1}}{h^2} &= -x_i
\end{aligned}$$

Με το πλέγμα που αναφέρεται στην εκφώνηση, οι κόμβοι είναι οι

$$x_i = 1 + \frac{i}{6}, i = 1:5$$

και η απόσταση των διαδοχικών κόμβων $h = 1/6$. (Βλέπετε ότι στις τιμές του δείκτη $i = 0, 6$ αντιστοιχούν τα ακραία σημεία του διαστήματος $[1,2]$.) Χρησιμοποιώντας τα παραπάνω καθώς και τις συνοριακές τιμές η διακριτοποίηση της ΔΕ οδηγεί στις εξισώσεις $TU = Y$ όπου T είναι το τριδιαγώνιο, συμμετρικό μητρείο μεγέθους $T \in \mathbb{R}^{5\times 5}$. Στην υπερδιαγώνιο και στην υποδιαγώνιο τα στοιχεία είναι $-1/h^2 = -1$. Η διαγώνιος αποτελείται από τα στοιχεία:

$$\frac{1}{36}[164, 180, 198, 218, 240]$$

Το δεξιό μέλος είναι:

$$Y = -\frac{1}{36}[7/6, 8/6, 9/6, 10/6, 11/6]^\top$$

2) Το σύστημα $TU = Y$ είναι τριδιαγώνιο. Έτσι, εφόσον είναι αντιστρέψιμο, θα μπορούσε να λυθεί χρησιμοποιώντας τον αλγόριθμο LU για τριδιαγώνια μητρεία. Το μητρείο είναι αντιστρέψιμο γιατί από το θεώρημα Gershgorin (παράρτημα, A.2.1) οι ιδιοτιμές του $\lambda_i, i = 1:8$ περιέχονται στο χωρίο που βρίσκεται στην ένωση των δίσκων

$$|\lambda - \frac{166}{81}| \le 2, |\lambda - \frac{166}{81}| \le 1.$$

Οι ιδιοτιμές είναι όλες πραγματικές γιατί $T = T^\top$. Οι παραπάνω ανισότητες συνεπάγονται ότι

$$-2 \le \lambda - \frac{166}{81} \le 2, -1 \le \lambda - \frac{166}{81} \le 1,$$

από τις οποίες ακολουθεί ότι $\lambda > 0$. Επομένως οι ιδιοτιμές είναι θετικές και καθώς το μητρείο είναι συμμετρικό θα είναι και ΣΘΟ. Επομένως μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε παραγοντοποίηση Cholesky για την επίλυση, το κόστος της οποίας είναι μικρότερο από της LU. $\square$