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

ΕΠΙΣΤΗΜΟΝΙΚΟΣ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ Ι *Φεβρουάριος 2004*

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 .

Ι. *(40 β.)* Να απαντήσετε στα παρακάτω ερωτήματα (στις ερωτήσεις Σωστό/Λάθος πρέπει να δικαιολογήσετε τις απαντήσεις για να βαθμολογηθείτε).

ΠΡΟΣΟΧΗ: ΝΑ ΔΙΟΡΘΩΘΟΥΝ ΤΑ ΛΑΘΗ! ***

1) Να εξηγήσετε σε τι ακριβώς είναι χρήσιμο, για την ανάλυση του σφάλματος ενός αλγορίθμου, αν γνωρίζουμε ότι είναι προς τα πίσω ευσταθής.

Επίλυση. Θεωρία: Είναι χρήσιμο γιατί αν ένας αλγόριθμος είναι πίσω ευσταθής μπορούμε να αναγάγουμε τον υπολογισμό του εμπρός σφάλματος σε μελέτη της ευστάθειας του προβλήματος (π.χ. μέσω της εύρεσης του δείκτη κατάστασης του προβλήματος). □

2) Έστω $U \in \mathbb{R}^{n\times n}$ άνω τριγωνικό και αντιστρέψιμο με μη μηδενικά στοιχεία στη διαγώνιο και το σύστημα $Ux = e_j$ όπου $e_j \in \mathbb{R}^n$ είναι το διάνυσμα με μονάδα στη j θέση και μηδέν αλλού. α) Να δείξετε ότι το αριθμητικό κόστος της επίλυσης του $Ux = e_j$ είναι $O(j^2)$. β) Ποιό είναι το ακριβές κόστος επίλυσης σε αριθμ. πράξεις.

Επίλυση. Προσέξτε ότι από τον ορισμό του, το x θα είναι η στήλη j του U^{-1}. Καθώς όμως γνωρίζουμε ότι το U^{-1} θα είναι και αυτό άνω τριγωνικό, τα μόνα μη μηδενικά στοιχεία του x θα είναι στις θέσεις 1 ως j. Επομένως, αρκεί να ασχοληθούμε με τον υπολογισμό αυτών των j στοιχείων. Δηλαδή, αν τεμαχίσουμε το πρόβλημα ως

$$\begin{pmatrix} U_{11} & U_{12} \\ 0 & U_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{e}_j \\ 0_{n-j} \end{pmatrix}$$

όπου $U_{11} \in \mathbb{R}^{j\times j}$, $U_{12} \in \mathbb{R}^{j\times(n-j)}$, $U_{22} \in \mathbb{R}^{(n-j)\times(n-j)}$, $x_1 = [\xi_1, ..., \xi_j]^\top \in \mathbb{R}^j$, $x_2 \in \mathbb{R}^{n-j}$, 0_{n-j} είναι το μηδενικό διάνυσμα με $n-j$ στοιχεία και $\hat{e}_j$ είναι ο διάνυσμα *μεγέθους* j με 1 στην τελευταία θέση και μηδέν στις υπόλοιπες θέσεις. Επομένως, μπορούμε να λάβουμε $x_2 = 0$ και να υπολογίσουμε μόνον τη λύση του $U_{11}x_1 = \hat{e}_j$. Το κόστος αυτό εύκολα υπολογίζεται ότι είναι $j^2 - j + 1$, καθώς ο αλγόριθμος έχει την ακόλουθη μορφή:

$\xi_j = 1/\eta_{j,j}$

$\hat{b} = -[\eta_{1,n}, ..., \eta_{j-1,n}]^\top \xi_j$

Λύση του $U(1 : j-1, 1 : j-1)[\xi_1, \ldots, \xi_{j-1}]^\top = \hat{b}$

Τα πρώτα δυο βήματα κοστίζουν j πράξεις ενώ το τελευταίο, που είναι η λύση ενός άνω τριγωνικού συστήματος μεγέθους $j-1$ με γενικό δεξιό μέλος είναι $(j-1)^2$. Επομένως το συνολικό αριθμητικό κόστος θα είναι $(j-1)^2 + j$. □

3) Σωστό ή Λάθος: Ένα σημαντικό μειονέκτημα της επίλυσης τετραγωνικών γραμμικών συστημάτων μέσω παραγοντοποίησης QR σε σχέση με την παραγοντοποίηση LU με μερική οδήγηση είναι το μεγαλύτερο κόστος της QR.

Επίλυση. Σωστό γιατί το κόστος επίλυσης με LU είναι $2n^3/3 + O(n^2)$ ενώ το κόστος με QR είναι $4n^3/3 + O(n^2)$. □

4) Σωστό ή Λάθος: Αν στο διάστημα $(0, 1)$ ισχύει η διαφορική εξίσωση $-\frac{d^2u}{dx} + b\frac{du}{dx} + cu = x$, όπου οι σταθερές $b, c > 0$, και οι συνοριακές συνθήκες είναι $u(0) = 0$, $u(1) = 1$, και διακριτοποιήσουμε το διάστημα με το πλέγμα $x_0 = 0, x_1 = 1/(n+1), \cdots, x_n = n/(n+1), x_{n+1} = 1$ και τις παραγώγους με κεντρισμένες πεπερασμένες διαφορές, τότε, το γραμμικό σύστημα που θα προκύψει θα έχει τη μορφή $AU = F$, όπου $A \in \mathbb{R}^{(n+1)\times(n+1)}$ και $A = A^\top$.

Επίλυση. Λάθος: Το μητρώο θα είναι $n \times n$. □

ΙΙ. (*20 β.*) Ο παρακάτω κώδικας MATLAB μπορεί να υλοποιηθεί έτσι ώστε να παράγει τα επιθυμητά αποτελέσματα πολύ πιο γρήγορα. Να εξηγήσετε τι τροποποιήσεις πρέπει να γίνουν και να γράψετε τον ταχύτερο κώδικα, χρησιμοποιώντας, αν χρειάζεται, και άλλες εντολές και συναρτήσεις της MATLAB . Υποτίθεται ότι ο βαθμωτός `p` και οι θετικοί ακέραιοι `m,n` έχουν ήδη αρχικοποιηθεί.

```
A=rand(m,n); B=rand(m,n), C=rand(m,n); X=rand(m+n,s); D=eye(m+n,m+n);
for i=1:m, for j=1:n, D(i,j)=A(i,j)*B(i,j)+C(i,j); end;end;
for i=1:m, for j=1:n, if (i==j), D(i,j)=p+D(j,i); end;end;end;
for k=1:s, Y(:,k)=D(1:m+n,1:m+n)\ X(:,k); end;
```

Επίλυση. Το βήμα

```
for i=1:m, for j=1:n, D(i,j)=A(i,j)*B(i,j)+C(i,j); end;end;
```

μπορεί να γίνει χωρίς το βρόχο

```
D(1:m,1:n)=A(1:m,1:n).*B(1:m,1:n)+C(1:m,1:n);
```

ενώ το

```
for i=1:m, for j=1:n, if (i==j), D(i,j)=p+D(j,i); end;end;end;
```

γίνεται

```
k=min(m,n); D(1:k,1:k)=p*eye(k)+D(1:k,1:k);
```

και τέλος το

```
k=min(m,n); D(1:k,1:k)=p*eye(k)+D(1:k,1:k);
```

γίνεται

```
[L,U] = lu(D(1:m+n,1:m+n)); Y=U\(L\ X);
```

□

III. (*20 β.*)

1. Έστω ότι το μητρώο $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ διασπάται ως $A = U\Sigma V^\top$ όπου Σ είναι διαγώνιο με τα στοιχεία τις διαγωνίου $\sigma_{j,j} = j$ εκτός από το τελευταίο που είναι $\sigma_{n,n} = 0$, $U^\top U = I$ και $V^\top V = I$. α) Να εξηγήσετε αν το A είναι αντιστρέψιμο ή όχι. β) Έστω ότι γνωρίζουμε ότι $b = Uz$ όπου $z = [1,\cdots,1,0]^\top$. Να υπολογίσετε, αν είναι εφικτό, το x που ικανοποιεί το σύστημα $Ax = b$ (Υπόδειξη: Μπορείτε να υπολογίσετε το x ως γραμμικό συνδυασμό των στηλών του V.)

2. Έστω ότι μετά την παραγοντοποίηση QR ενός μητρώου A, το αποτέλεσμα που επιστρέφεται στο A είναι $[1,4,5;1,2,6;1,2,3]$. Από αυτά τα στοιχεία να υπολογίσετε τους παράγοντες Q, R και το αρχικό A.

Επίλυση. 1) Το μητρώο δεν είναι αντιστρέψιμο γιατί $\sigma_n = 0$. Επίσης $A = \sum_{j=1}^{n-1}\sigma_j u_j v_j^\top$, επομένως λόγω ορθογωνιότητας του U, $U\Sigma V^\top x = Uz$ επομένως $\Sigma V^\top x = z$. Καθώς το $x \in \mathbb{R}^n$ και το V αποτελεί ορθογώνια βάση, μπορούμε να γράψουμε $x = Vy$ για κάποιο y, επομένως $\Sigma y = z$. Παρατηρώντας την κάθε συνιστώσα, φαίνεται ότι $\sigma_j\psi_j = 1$ για $j = 1 : n-1$ ενώ το ψ_n μπορεί να είναι αυθαίρετο. Επομένως, $x = \sum_{j=1}^{n-1}\frac{1}{j}v_j$.

2) Το R είναι το άνω τριγωνικό τμήμα των στοιχείων που επιστρέφονται στο A. Το αυστηρά κάτω τριγωνικό τμήμα των στοιχείων που επιστρέφονται στο A με επιπλέον μονάδες στη διαγώνιο περιέχει τα στοιχεία των διανυσμάτων Householder. Ειδικότερα:

$$u_1 = [1;1;1], u_2 = [0;1;2]$$

οπότε

$$H_1 = I - 2u_1u_1^\top/u_1^\top u_1$$
$$H_2 = I - 2u_2u_2^\top/u_2^\top u_2$$

επομένως

$$H_2 = I - \frac{2}{5}\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 2 & 4 \end{pmatrix}, \quad H_1 = I - \frac{2}{3}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix},$$

επομένως

$$H_2 = \frac{1}{5}\begin{pmatrix} 5 & 0 & 0 \\ 0 & 3 & 4 \\ 0 & 4 & -3 \end{pmatrix}, \quad H_1 = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 1 & -2 & -2 \\ -2 & 1 & -2 \\ -2 & -2 & 1 \end{pmatrix}.$$

Επίσης, $H_2 H_1 A = R$ επομένως $A = H_1 H_2 R$ λόγω ορθογωνιότητας και συμμετρίας των H_j. Επομένως

□

IV. (*20 β.*)

1. Έστω ότι ο δείκτης κατάστασης υπολογισμού της λύσης ενός συστήματος $Ax = b$ ως προς την ευκλείδεια νόρμα είναι 101×10^6 όπου ενώ γνωρίζετε ότι η υπολογισμένη λύση $\hat{x}$ ικανοποιεί $\|b - A\hat{x}\|_2 = 10^{-12}$ καθώς επίσης ότι $\|\hat{x}\|_2 = 10$, $\|A\|_2 = 10$ και $\|b\|_2 = 1$. Να υπολογίσετε ένα άνω φράγμα για τη νόρμα του σχετικού εμπρός σφάλματος, δηλ. $\|x - \hat{x}\|_2 / \|x\|_2$.

2. Να περιγράψετε τι πληροφορία σχετικά με την χρησιμοποιούμενη αριθμητική κινητής υποδιαστολής επιστρέφει το παρακάτω πρόγραμμα στο s και να εξηγήσετε γιατί:

```
s = 0; b = 1.0;
while (((b*2 + 1.0) -b*2)-1.0 == 0.0), s= s+1; b = b*2; end
```

1)

Επίλυση. Σύμφωνα με τη θεωρία μπορούμε, με βάση τα παραπάνω, να υπολογίσουμε το (εκ των υστέρων) πίσω σφάλμα

$$\inf_{\epsilon>0}\{\epsilon | \|\Delta A\| \le \epsilon\|A\|, \|\Delta b\| \le \epsilon\|b\|\}$$

(χρησιμοποιούμε παντού την ευκλείδεια νόρμα) ως

$$\eta \quad = \quad \frac{\|b - A\hat{x}\|}{\|A\|\|\hat{x}\| + \|b\|} = \frac{10^{-12}}{10 \times 10 + 1} = \frac{10^{-12}}{101}$$

Γνωρίζουμε επίσης ότι το εμπρός σφάλμα φράσσεται ως εξής:

$$\frac{\|x - \hat{x}\|_2}{\|x\|_2} \quad \le \quad \frac{2\eta\kappa_2(A)}{1 - \kappa_2(A)\eta} = 2\frac{10^{-12}}{101} 101 \times 10^6 \frac{1}{1 - \frac{10^{-12}}{101} 101 \times 10^6} = \frac{2 \times 10^{-6}}{1 - 10^{-6}}.$$

2) Η μεταβλητή s μετρά τα βήματα, από το μηδενικό. Στο βήμα s, η μεταβλητή b περιέχει τον αριθμό $b = 2^t$. Προσέξτε πώς εκτελείται η πρόσθεση με το 1.0. Το 1.0 πρέπει πρώτα να διαιρεθεί με το 2^{s+1} ώστε τα δύο ορίσματα να αποκτήσουν τον ίδιο εκθέτη: $2^{s+1} + 2^{-(s+1)} * 2^{s+1}$). Αλλά ο όρος $2^{-(s+1)}$ γίνεται 0 αν s είναι ο αριθμός των δυαδικών ψηφίων της ουράς οπότε ισχύει ότι $(b * 2 + 1.0) = b * 2$, επομένως τότε $(b * 2 + 1.0) - b * 2) - 1 \ne 0$ όταν s είναι ο αριθμός των ψηφίων της ουράς.

□