Επιστημονικός Υπολογισμός Ι
3η Εργαστηριακή Άσκηση

Επιστροφή πριν τις 1/2/16 γιά πλήρη βαθμό

Προσοχή:

- *Μπορείτε να συζητήσετε την άσκηση με συναδέλφους σας αλλά αν διαπιστωθεί αντιγραφή, θα υποπολλαπλασιαστεί ο βαθμός σας. Δείτε και τις οδηγίες που αναφέρονται στους κανόνες βαθμολογίας!*

- Η άσκηση είναι προαιρετική. Αν δεν την καταθέσετε, οι 2 προηγούμενες ασκήσεις θα συνεισφέρουν συνολικά 20% στην τελική βαθμολογία. Αν την κατεθέσετε, θα μετρήσει για επιπλεόν 10% μόνον αν αυτό έχει θετική επίπτωση στη συνολική σας βαθμολογία.

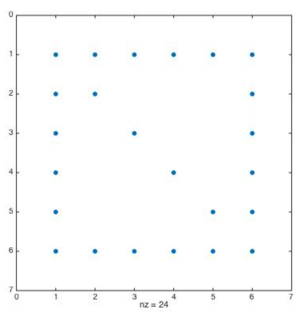
Η άσκηση αυτή αναφέρεται σε μοντέλα και στη διαχείριση υπολογισμών με αραιά μητρώα που προκύπτουν σε ορισμένες εφαρμογές με εφαρμογή στην επίλυση διαφορικών εξισώσεων και στη βαθμολόγηση κόμβων δικτύου. Οι ερωτήσεις είναι αρκετές αλλά οι απαντήσεις στις περισσότερες δίνονται πολύ σύντομα. Συνιστάται να διαβάσετε πρώτα τις οδηγίες των `pcg`, `cholesky` και να θυμηθείτε τις επιλογές της MATLAB κατά την επίλυση συστημάτων με την ανάποδη κάθετο.

Θα χρησιμοποιηθούν τα εξής μητρώα: 1) ειδικό μητρώο που περιγράφεται παρακάτω. 2) μητρώο από την διακριτοποίηση και επίλυση διαφορικής εξίσωσης (συνοριακό πρόβλημα 2 σημείων).

Σε όλες τις περιπτώσεις τα μητρώα θα πρέπει να κατασκευαστούν εξαρχής ως αραιά ώστε να ελαχιστοποιηθεί ο χώρος αποθήκευσής τους. Δείτε `help sparfun` και τις συναρτήσεις `speye`, `spdiags` καθώς και τη λειτουργία της ανάποδης καθέτου για την επίλυση συστήματος όταν το μητρώο είναι αραιό.

Ειδικότερα, τα μητρώα της πρώτης κατηγορίας είναι ως εξής: Είναι μεγέθους n, και είναι παντού 0 εκτός από την κύρια διαγώνιο, που είτε περιέχει μια δοθείσα τιμή ή αποτελείται από ένα δοθέν διάνυσμα και τις γραμμές και στήλες 1 και n που περιέχουν την τιμή 1 εκτός από τις τιμές που βρίσκονται στην κύρια διαγώνιο που είναι όπως περιγράψαμε πριν. Για παράδειγμα, η δομή στην περίπτωση που $n = 6$ είναι όπως στην εικόνα.

Δεδομένου ότι μας ενδιαφέρει να χρησιμοποιήσουμε τις δυνατότητες του MATLAB για την κατασκευή μητρώων αυτού του τύπου για πολύ μεγάλα μεγέθη, θα πρέπει να γράψετε συνάρτηση κατασκευής του, με όνομα `matrix_build_AM(n,a)`[1] με μοναδική είσοδο το n και την τιμή (βαθμωτός) ή το διάνυσμα της διαγωνίου και το αποτέλεσμα να είναι το μητρώο *σε αραιή μορφή*. Είναι σημαντικό η συνάρτηση να κατασκευάζει απευθείας το αραιό μητρώο (δείτε την εντολή `sparse`) και σε καμία φάση



[1] όπου το AM είναι τα 4 τελευταία ψηφία του AM σας.

να μην δημιουργείται το μητρώο σε πυκνή μορφή ώ-
στε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί για πολύ μεγάλες
τιμές του n.

Να απαντήσετε στα παρακάτω ερωτήματα σχετικά με το παραπάνω μητρώο.

1. Να κατασκευάσετε τη συνάρτηση `matrix_build_AM(n,a)` όπως περιγράψαμε.

2. Για $n = 6$ και διαγώνιο σταθερή με τιμή το AM σας, να ονομάσετε το μητρώο `A=matrix_build_AM(n,AM)` και να το γράψετε σε μορφή CSR.

3. Να γράψετε σε μορφή CSC το μητρώο B που προκύπτει αν θέσουμε `B = tril(A)`.

4. Να γράψετε τον αριθμό των μη μηδενικών στοιχείων του A για γενικό n και μη μηδενικό a (για συγκεκριμένες τιμές του n η τιμή αυτή υπολογίζεται από τη συνάρτηση `nnz`).

5. Να γράψετε συνάρτηση `matrix_mv_AM(a,x)` πολλαπλασιασμού διανύσματος `x` με το μητρώο που περιγράψαμε. Προσοχή: η συνάρτηση δεν πρέπει να κατασκευάζει το μητρώο αλλά να υπολογίζει το γινόμενο με βάση τα στοιχεία που γνωρίζετε για τη δομή του και τα δεδομένα εισόδου `a, x`.

6. Έστω ότι `A=matrix_build_AM(n,n)`. Να δείξετε θεωρητικά ότι τότε μητρώο μπορεί να παραγοντοποιηθεί χρησιμοποιώντας Cholesky. (Υπόδειξη/λέξη κλειδί: Gerschgorin).

Στη συνέχεια θα εξετάσουμε την αποτελεσματικότητα διαφορετικών μεθόδων επίλυσης με μητρώα σαν και αυτό που χρησιμοποιήσαμε ως τώρα (δηλ. μητρώα της πρώτης κατηγορίας) για τις ακόλουθες τιμές $n = \{500, 10^3, 5 \times 10^3, 10^4, 2 \times 10^4\}$ και διάφορες επιλογές για τη διαγώνιο.

Το δεξιό μέλος b στην επίλυση του $Ax = b$ θα επιλέγεται έτσι ώστε η ακριβής λύση να είναι το διάνυσμα όλο μονάδες.

Έστω ότι `A=matrix_build_AM(n,n)`.

7. Για βοήθεια στη συνέχεια, να καταγράψετε ενδεικτικά όταν `n=1000` το δείκτη κατάστασης του μητρώου ως προς τη νόρμα 1 με το `condest` καθώς και την κατανομή των ιδιοτιμών του μητρώου (π.χ. σε ιστόγραμμα ή με `sort(eig(A))`.

8. Να ετοιμάσετε πίνακα όπου η πρώτη στήλη θα περιέχει τις τιμές του n και οι υπόλοιπες στήλες θα περιέχουν δύο τιμές, αφ' ενός το χρόνο επίλυσης[2] και αφ' ετέρου τη νόρμα $\|r\|_2 = \|b - A\tilde{x}\|_2$ του καταλοίπου με τις μεθόδους που περιγράφονται στη συνέχεια.

   (α΄) Με παραγοντοποίηση Cholesky, δηλ. υπολογίζοντας πρώτα τον τριγωνικό παράγοντα `R=chol(A)` και επιλύοντας μέσω της παραγοντοποίησης $R^\top R = A$. Για μετέπειτα χρήση, προσέξτε τη δομή του R (χρησιμοποιώντας `spy`).

[2] Να εκτιμήσετε τον χρόνο επίλυσης με αξιόπιστη μέθοδο.

(β′) Με τη συνάρτηση `pcg`. Στην περίπτωση αυτή να μην χρησιμοποιήσετε το μητρώο A απευθείας αλλά μόνον μέσω της συνάρτησης πολλαπλασιασμού που κατασκευάσατε πιο πριν. Επίσης να θέσετε ως κριτήρια τερματισμού το 1000 για το μέγιστο αριθμό επαναλήψεων και το 10^{-8} για τη 2-νόρμα του καταλοίπου και να κατα•γράψετε κάθε φορά τον αριθμό των επαναλήψεων που χρειάστηκαν για τη σύγκλιση.

(γ′) Με την ανάποδη κάθετο.

9. Με την εντολή `p = amd(A)`, επιστρέφεται μετάθεση τέτοια ώστε το μητρώο `A(p,p)` να έχει πιο «καλή μορφή» για την εφαρμογή παραγοντοποίησης όπως η Cholesky. Δοκιμάστε να την εφαρμόσετε για $n = 1000$ και δείξτε τη δομή του παράγοντα Cholesky όπως πριν με `spy`. Τι παρατηρείτε;

10. Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσετε την παραπάνω μετάθεση για να λύσετε ως προς x και χρήση Cholesky το ισοδύναμο σύστημα $P^\top APP^\top x = P^\top b$. Σημειώστε τους χρόνους επίλυσης και το αντίστοιχο κατάλοιπο (χωρίς το χρόνο που χρειάζεται να υπολογιστεί η μετάθεση) σε άλλη στήλη του ίδιου πίνακα.

11. Να σχολιάσετε όλα τα αποτελέσματά σας και να εξηγήσετε τη συμπεριφορά των μεθόδων ως προς την ταχύτητα και το μέγεθος του $\|b - A\tilde{x}\|_2$ που προκύπτει σε όλες τις περιπτώσεις όπου $\tilde{x}$ είναι η υπολογισμένη λύση με την αντίστοιχη μέθοδο. Μερικά στοιχεία άξια σχολιασμού: Ποιά μέθοδος είναι η καλύτερη και ποιά η χειρότερη ως προς την ταχύτητα για κάθε n και γιατί; Τι μέθοδο χρησιμοποιεί η ανάποδη κάθετος; Γιατί η `pcg` φαίνεται να τερματίζει σε λίγες επαναλήψεις;

12. Για `A=matrix_build_AM(1000,a)`, να βρείτε μια τιμή για το `a` τέτοιο ώστε το μητρώο A να επιδέχεται παραγοντοποίησης Cholesky αλλά αν θέσουμε

    `A=matrix_build_AM(1000,a-1)`,

    αυτό να μην είναι πλέον εφικτό. Να εκτιμήσετε το δείκτη κατάστασης του μητρώου ως προς τη νόρμα 1 για την οριακή αυτή περίπτωση και να δείτε αν αλλάζει σημαντικά ο αριθμός των επαναλήψεων της `pcg` σε σχέση με τις προηγούμενες περιπτώσεις. Πως εξηγείτε το αποτέλεσμα;

Το δεύτερο μητρώο προέρχεται από την διακριτοποίηση της ΔΕ

$$-(1 + x^2)u_{xx} - 2xu_x + 4u = 1$$

στο διάστημα $\Delta = [0, 1]$ με συνοριακές συνθήκες Dirichlet

$$u(0) = 0, u(1) = 1.$$

Να χρησιμοποιήσετε πεπερασμένες διαφορές δεύτερης τάξης για την προσέγγιση των παραγώγων της άγνωστης συνάρτησης u. Το πλέγμα Δ_h να περιέχει $n + 2$ ισαπέχοντες κόμβους του διαστήματος Ω, αριθμημένα διαδοχικά, δηλ. οι κόμβοι είναι διατεταγμένοι ως $\xi_0, \xi_1, ..., \xi_{n+1}$, όπου $\xi_0 = 0$, $\xi_{n+1} = 1$ είναι τα άκρα του διαστήματος.

13. Να γράψετε τις 3 εξισώσεις που προκύπτουν από τη διακριτοποίηση της ΔΕ στις θέσεις ξ_1, ξ_k, ξ_n όπου $1 < k < n$.

14. Στη συνέχεια να κατασκευάσετε το αραιό μητρώο και δεξιό μέλος που προκύπτουν όταν $n = 1000$ και να δοκιμάσετε να χρησιμοποιήσετε την `pcg` για την επίλυση του παραπάνω συστήματος. Δώστε το μέγιστο αριθμό επαναλήψεων που θα μπορούσε να χρειαστεί η μέθοδος σε αριθμητική άπειρης ακρίβειας (δηλ. `maxit=1000`). Εξηγείστε τι παρατηρείτε. Γιατί αποτυγχάνει η μέθοδος;

15. Παρατηρώντας ότι η ΔΕ είναι ισοδύναμη[3] με την

$$-((1 + x^2)u_x)_x + 4u = 1$$

να διακριτοποιήσετε προσεκτικά και να γράψετε όπως και πριν τις 3 εξισώσεις που προκύπτουν από τη διακριτοποίηση της ΔΕ στις θέσεις ξ_1, ξ_k, ξ_n όπου $1 < k < n$. Στόχος είναι το τελικό μητρώο να είναι συμμετρικό.

16. Να κατασκευάσετε το νέο γραμμικό σύστημα που προκύπτει όταν $n = 1000$. Στη συνέχεια, να προσεγγίσετε τη λύση μέσω της `pcg`. Πόσες επαναλήψεις χρειάζονται ώστε το κατάλοιπο να γίνει μικρότερο του 10^{-6}; Επίσης, αν θεωρήσετε ως «ακριβή» τη λύση που υπολογίζεται με την ανάποδη κάθετο, ποιό θα είναι το σχετικό σφάλμα της προσέγγισης που επεστράφη από την `pcg`; Τέλος να δείξετε την πορεία της `pcg` με σχήμα όπου ο άξονας των τετμημένων θα δείχνει τις επαναλήψεις (1, 2, ...) και ο άξονας των τεταγμένων τις τιμές του *σχετικού καταλοίπου*[4]. Τι παρατηρείτε για την πορεία σύγκλισης; Πως συγκρίνεται με τα αποτελέσματα που είχατε λάβει στο πρώτο μέρος της παρούσας άσκησης (δηλ. με το μητρώο `matrix_build_AM(n,n)`); Σχολιάστε.

Τρόπος Παράδοσης Εργασίας

- **Παραδοτέα:**
  1. Αναφορά (σε μορφή pdf και κώδικας της άσκησης (MATLAB), αμφότερα συμπιεσμένα σε αρχείο zip με ονομασία **AM_prb3_2015** π.χ. **3948_prb3_2015**.
  2. Εκτυπωμένη αναφορά της εργασίας σας. Η αναφορά πρέπει να είναι διπλής όψης με μέγεθος γραμματοσειράς 11 με διάστημα 1.5.
- **Παράδοση & Αποστολή:** Το συμπιεσμένο αρχείο παραδίδεται μέσω της πλατφόρμας e-class ενώ υποχρεούστε να παραδώσετε και εκτυπωμένη αναφορά.

Ιδιαίτερη έμφαση θα δοθεί στον τρόπο παρουσίασης της εργασίας και των αποτελεσμάτων. Για τη συγγραφή της αναφοράς μπορείτε εκτός των γνωστών εργαλείων να πειραματιστείτε και με άλλα όπως το LaTeX ή το εργαλείο του MATLAB `publish`.

[3]Στη βιβλιογραφία, η παρακάτω εξίσωση λέγεται ότι είναι σε *αυτοσυζυγή μορφή*.

[4]Υποθέτουμε ότι η τιμή εκκίνησης των επαναλήψεων είναι πάντα το μηδενικό διάνυσμα και επομένως το σχετικό κατάλοιπο βρίσκεται από το κατάλοιπο που υπολογίζει η `pcg` διαιρούμενο με το $\|b\|_2$.