homework_20240903

1. Let $\hat{x}$ be an approximation to x. In practice it is often much easier to estimate $\tilde{E}_{\text{rel}} = |x-\hat{x}|/|\hat{x}|$ compared to $E_{\text{rel}} = |x-\hat{x}|/|x|$. What is the relationship between E_{rel} and $\tilde{E}_{\text{rel}}$?

真实相对误差

$$E_{\text{rel}}(\hat{x}) = \frac{|x-\hat{x}|}{|x|} = \frac{|x-\hat{x}|}{|\hat{x}+(x-\hat{x})|},$$

根据 $|x| \approx |\hat{x}|$, 可以知道 $|x-\hat{x}|$ 很小,

因此作估计

$$E_{\text{rel}}(\hat{x}) \approx \frac{|x-\hat{x}|}{|\hat{x}|+|x-\hat{x}|},$$

进而获得 E_{rel} 和 $\tilde{E}_{\text{rel}}$ 间的近似关系

$$E_{\text{rel}}(\hat{x}) \approx \frac{|x-\hat{x}|}{|\hat{x}|} \cdot \frac{1}{1+\frac{|x-\hat{x}|}{|\hat{x}|}} = \frac{\tilde{E}_{\text{rel}}(\hat{x})}{1+\tilde{E}_{\text{rel}}(\hat{x})}.$$

由此可以知道 $E_{\text{rel}} < \tilde{E}_{\text{rel}}$.

在计算中，由于不知道 x 的值，通常使用 $\tilde{E}_{\text{rel}} = |x-\hat{x}|/|\hat{x}|$, 但是 $\tilde{E}_{\text{rel}}$ 中依然含 x, 实际上可能会使用连续近似法:

(1). 设 $\hat{x}_k$ 是第 k 步的近似值.
(2). 设 $\hat{x}_{k+1}$ 是下一步第 $(k+1)$ 步的近似值.

然后可以计算近似相对误差为:

$$\tilde{E}_{\text{rel}}(\hat{x}_{k+1}) = \frac{|\hat{x}_{k+1}-\hat{x}_k|}{|\hat{x}_{k+1}|}.$$

如果算法收敛，$\tilde{E}_{\text{rel}}$ 应该随着 k 的增加而变小. 当 $\tilde{E}_{\text{rel}}$ 低于某个阈值时，算法停止，表明连续近似值已足够接近，因而能足够接近真实值 x.

一个例子是考虑用牛顿迭代法求方程的近似数值解，迭代公式为：

$$\hat{x}_{k+1} = \hat{x}_k - \frac{f(\hat{x}_k)}{f'(\hat{x}_k)}$$

这里真实的根 x 是未知的. 如果 $\tilde{E}_{\text{rel}}(\hat{x}_{k+1})$ 小于某个阈值，则可以认为 $\hat{x}_{k+1}$ 足够接近真实的根 x.

2. How to estimate $f(x) = \tan x - \sin x$ for $x \approx 0$ so that numerical cancellation is avoided?

可以考虑使用泰勒级数展开

$$\begin{aligned}
\tan x &= x + \frac{x^3}{3} + \frac{2x^5}{15} + o(x^6) \\
\sin x &= x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + o(x^6) \\
f(x) = \tan x - \sin x &= \frac{x^3}{2} + \frac{x^5}{8} + o(x^6) \\
&= \frac{x^3}{2} + o(x^4)
\end{aligned}$$

as $x \approx 0$

于是可有如下估计，估计式精度可根据需要调整

$$f(x) \approx \frac{x^3}{2} + \frac{x^5}{8}$$

3. Let A be a square banded matrix with half-bandwidth β (i.e., $a_{ij} = 0$ if $|i - j| > \beta$). Suppose that the LU factorization of A (without pivoting) is $A = LU$. Show that both L and U are banded matrices with half-bandwidth β.

设下三角矩阵 L 为

$$L=\begin{bmatrix}l_{11} & 0 & 0 & \dots & 0\\ l_{21} & l_{22} & 0 & \dots & 0\\ l_{31} & l_{32} & l_{33} & \dots & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ l_{n1} & l_{n2} & l_{n2} & \dots & l_{nn}\end{bmatrix}$$

其中 $l_{ii}=1,\quad i=1,2,\cdots,n$

设上三角矩阵 U 为

$$U=\begin{bmatrix}u_{11} & u_{12} & u_{13} & \dots & u_{1n}\\ 0 & u_{22} & u_{23} & \dots & u_{2n}\\ 0 & 0 & u_{33} & \dots & u_{3n}\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & \dots & u_{nn}\end{bmatrix}$$

带状矩阵 A 可以这样描述

$$a_{ij}=0,\ when\begin{cases}i<j-\beta & \text{对应右上角}\\ i>j+\beta & \text{对应左下角}\end{cases}$$

先考虑矩阵 L 作为行变换矩阵左作用于矩阵 U, 并考察作变换后新矩阵 $U_1,U_2,\cdots,U_n$ 的右上角区域, U_k 表示 U 的前 k 行元素被改变后的结果.

L 第一行的非零元素 $l_{11}=1$ 表示使 U 的第一行的全部元素变为原来的 $l_{11}=1$ 倍, 而由于 L 是下三角矩阵，因此 L 第一行之后的所有行的元素不会再对矩阵 U 的第一行产生影响. 如此获得 U_1.

之后比对 U_1 的第一行和 A 的第一行, 由于A 的第一行中满足 $i<j-\beta$ 条件的元素为零，可以得到 U 的第一行中满足 $i<j-\beta$ 条件的元素也为零，亦即 $u_{1(2+\beta)},\cdots,u_{1n}$ 为零.

L 第二行的非零元素是 l_{21} 和 $l_{22}=1$. 其中 l_{22} 的作用与 $l_{11}=1$ 类似, 其作用是使 U_1 的第二行的全部元素变为原来的 $l_{22}=1$ 倍. 而 l_{21} 表示将 U_1 的第一行的 l_{21} 倍加到 U_1 的第二行上, 其中加到第二行 $u_{2(3+\beta)},\cdots,u_{2n}$ 的 $l_{21}u_{1(3+\beta)},\cdots,l_{21}u_{1n}$ 都是零, 这相当于对于 U_1 的第二行中满足 $i<j-\beta$ 条件的元素只受到 $l_{22}=1$ 的作用. 而由于 L 是下三角矩阵，因此 L 第二行之后的所有行的元素不会再对矩阵 U_1 的第二行产生影响. 如此获得 U_2.

之后比对 U_2 的第二行和 A 的第二行的元素, 可以得到 U_2 的第二行中满足 $i < j - \beta$ 条件的元素也为零，亦即 $u_{2(3+\beta)}, \cdots, u_{2n}$ 为零.

按以上方法依次比对经 L 作用后的 U_k 和带状矩阵 A 的第k行, 直到 $k = n$. 可以发现 U 各行中满足 $i < j - \beta$ 条件的元素都为零, 而 U 本来就是上三角矩阵, 自然成立：满足 $i > j + \beta$ 条件的元素都是零. 因而 U 也是带状矩阵, 且半带宽也是 β .

考虑对 $A = LU$ 两边进行转置：$A^T = U^T L^T$,

不难发现 A^T 也是带状矩阵, U^T是下三角矩阵, L^T是上三角矩阵. 按分析 $A = LU$ 中 U 为带状矩阵的方法同理可获得：L^T 为带状矩阵, 因而 L 为带状矩阵, 考虑到转置不改变带宽, L 的半带宽也是 β.

4. Find the exact LU factorization of the $n \times n$ matrix

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

考虑对该矩阵进行高斯消元法

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ -1 & -1 & 1 & \dots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & 1 & 1 \\ -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\to \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 2 \\ 0 & -1 & 1 & \dots & 0 & 2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & -1 & -1 & \dots & 1 & 2 \\ 0 & -1 & -1 & \dots & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

$$\to \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & -1 & \dots & 1 & 4 \\ 0 & 0 & -1 & \dots & -1 & 4 \end{bmatrix}$$

$$\to \dots \to \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 2^{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 2^{n-1} \end{bmatrix}$$

将行变换的结果记为, $U = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 & 4 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 2^{n-2} \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 2^{n-1} \end{bmatrix}$.

将各个行变换用矩阵 $\hat{L}$ 表示, $\hat{L} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \end{bmatrix}$.

于是有 $\hat{L}A = U$.

记 $\hat{L}$ 的逆矩阵为 L , $L = \hat{L}^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & -1 & 1 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ -1 & -1 & -1 & \dots & 1 & 0 \\ -1 & -1 & -1 & \dots & -1 & 1 \end{bmatrix}$.

如此有 $A = LU$.

5. Implement Gaussian elimination (without pivoting) for solving non-singular linearsystems. You may assume that no divide-by-zero error is encountered. Measure the execution time of your program in terms of matrix dimensions and visualize the result by a log–log scale plot. (You may generate your test matrixes with normally distributed random elements.)

假设系数矩阵是 $n \times n$ 的方阵, 亦即解向量是 n 维的.

将加减乘除同权重地看作一次运算，则通过高斯消元法（不进行主元选取）变换系数矩阵需要的运算次数是:

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^{n-1} ((n-k) + 2(n-k)^2) &= \frac{n(n-1)}{2} + \frac{(n-1)n(2n-1)}{3} \\ &= \frac{2n^3}{3} + O(n^2) \end{aligned}$$

获得解向量所需要的运算次数是:

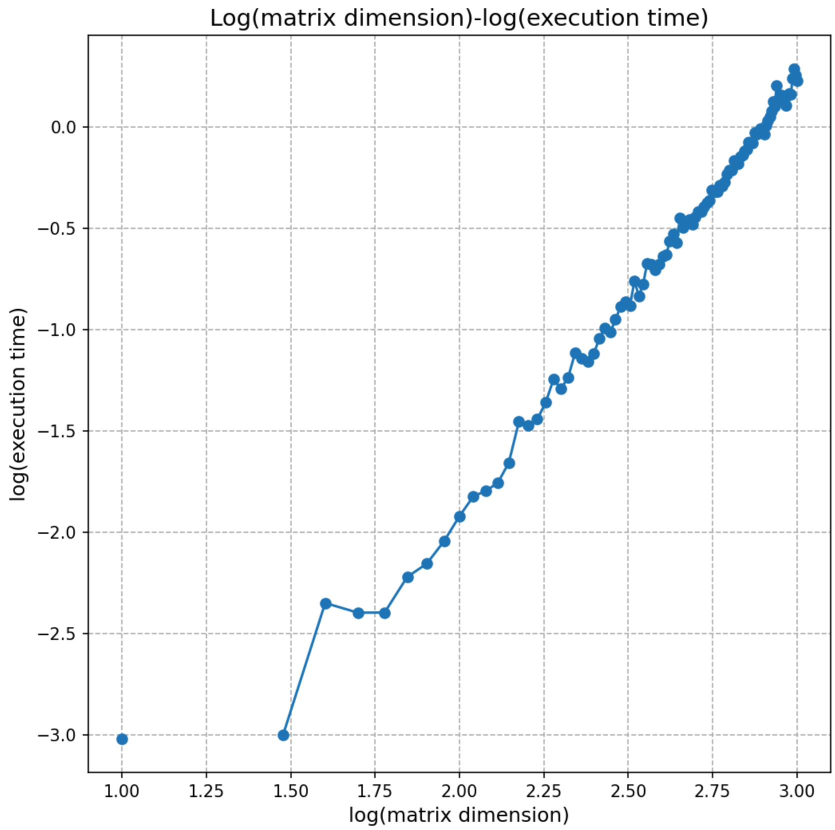
$$
1+\sum_{k=1}^{n-1}(2k+1)=1+n(n-1)+(n-1)=O(n^2)
$$

理论上最多运算次数:

$$
\frac{2n^3}{3}+O(n^2)
$$

```
import numpy as np
import time
import matplotlib.pyplot as plt

def gaussian_elimination(A, b):
    n = len(b)
    Ab = np.hstack([A, b.reshape(-1, 1)])


    for i in range(n):
        for j in range(i+1, n):
            factor = Ab[j, i] / Ab[i, i]
            Ab[j, i:] -= factor * Ab[i, i:]

    x = np.zeros(n)
    for i in range(n-1, -1, -1):
        x[i] = (Ab[i, -1] - np.dot(Ab[i, i+1:n], x[i+1:n])) / Ab[i, i]

    return x


def generate_test_matrix(n):
    A = np.random.randn(n, n)
    b = np.random.randn(n)
    return A, b
```

```python
def measure_execution_time(n):
    A, b = generate_test_matrix(n)
    start_time = time.time()
    gaussian_elimination(A, b)
    end_time = time.time()
    return end_time - start_time


if __name__ == "__main__":
    dimensions = np.arange(10, 1001, 10)
    times = []

    for n in dimensions:
        exec_time = measure_execution_time(n)
        times.append(exec_time)
    log_dimensions = np.log10(dimensions)
    log_times = np.log10(times)

    plt.figure(figsize=(8, 6))
    plt.plot(log_dimensions, log_times, marker='o', linestyle='-')
    plt.xlabel('log(matrix dimension)', fontsize=12)
    plt.ylabel('log(execution time)', fontsize=12)
    plt.title('Log(matrix dimension)-log(execution time)', fontsize=14)
    plt.grid(True, which="both", ls="--")
    plt.show()
```



估计当矩阵的维度足够大时，拟合的直线斜率大约是 $2\frac{2}{3}$，小于理论最大斜率 3 .

6. (optional) Write a program to solve the quadratic equation $ax^2+bx+c=0$ with real coefficients. Describe how to avoid cancellation when the equation has a tiny root.

当 $|b| \gg |ac|$ 时, 求根公式的某个分子 $-|b|+\sqrt{(b^2-4ac)}$ 会发生相消现象. 按照二次方程的韦达定理, 我们有:

$$\begin{cases} x_1+x_2 &= -b/a \\ x_1x_2 &= c/a \end{cases}$$

不妨设 $b>0$, 可以先计算出方程的一个根 $x_1=\frac{-b-\sqrt{(b^2-4ac)}}{2a}$, 此时分子不会相消, 再利用韦达定理，可以获得另一个根 $x_2=\frac{2c}{-b-\sqrt{(b^2-4ac)}}$, 以下是上述描述的实现:

```
from math import sqrt

def determinant(a, b, c):
    delta = b**2 - 4*a*c
    return delta
```

```python
def is_root_real(a, b, c):
    delta = determinant(a, b, c)
    if delta >= 0:
        return True
    else:
        return False


def quad_fun_solve(a, b, c):
    if is_root_real(a, b, c):
        delta = determinant(a, b, c)
        # 判断是否会发生消元误差
        if abs(delta - abs(b)) < 1e-2:
            if b > 0:
                x1 = (-b - sqrt(delta)) / (2*a)
                x2 = 2*c / (-b - sqrt(delta))
            else:
                x1 = (-b + sqrt(delta)) / (2*a)
                x2 = 2*c / (-b + sqrt(delta))
        else:
            x1 = (-b + sqrt(delta)) / (2*a)
            x2 = (-b - sqrt(delta)) / (2*a)
        return x1, x2
    else:
        return None


if __name__ == "__main__":
    a, b, c = map(float, input("请输入方程系数 a b c, 例如 1 2 3 ").split())


    result = quad_fun_solve(a, b, c)
    if result:
        x1, x2 = result
        print(f"x1 = {x1}, x2 = {x2}")
    else:
        print("无实数根。")
```

7. (optional) Suppose that you are evaluating the harmonic series using IEEE double precision floating-point numbers and obtained a “converged” result. Make an estimate on when the computation converges, and what is the final result.

假设调和级数的和IEEE 75464位双精度浮点数进行表示时二进制指数转换成的十进制指数是5，亦即先假设调和级数的和大概在32到64之间.

而双精度浮点数不计入首位的有效位数为52位二进制数**，也就是说能精确表示的最小差异大约是 2^{-52}，即约为 2.22×10^{-16}，结合假设的指数位置为 5，最小差异应该约为 7.11×10^{-15}.

当 $\frac{1}{n}$ 小于这个精度时，不再影响最终的结果，即当 $\frac{1}{n} < 7.11 \times 10^{-15}$ 时，调和级数看上去就收敛了.

$$n > \frac{1}{7.11 \times 10^{-15}} \approx 1.41 \times 10^{14}$$

检验此时的调和级数，有调和级数的估计：

$$1 + \frac{1}{2} + \ldots + \frac{1}{n} = ln(n) + c \qquad c \approx 0.57721\ldots$$

估算调和级数大概是 $ln(1.41 \times 10^{14}) + c \approx 33.15512748631743$ ，符合假设.

因此，当 n 达到约 1.41×10^{14} 时，调和级数收敛至 33.16.