Επιστημονικός Υπολογισμός Ι
3η Εργαστηριακή Άσκηση

Ημερομηνία επιστροφής για πλήρη βαθμό: **24/01/2014** Ώρα: **23:59**
Δεν θα δοθεί καμία παράταση!!

Προσοχή: *Μπορείτε να συζητήσετε την άσκηση με συναδέλφους σας αλλά αν διαπιστωθεί αντιγραφή, θα* ***μηδενιστεί*** *ο βαθμός σας. Δείτε και τις οδηγίες που αναφέρονται στους κανόνες βαθμολογίας! Υπενθυμίζουμε ότι σε όλες τις ερωτήσεις πρέπει να κάνετε ό,τι μπορείτε για να έχετε καλή επίδοση και αποδεκτό σφάλμα.*

Η παρούσα εργασία αναφέρεται σε θέματα επίλυσης γραμμικών συστημάτων με διάφορες μεθόδους και μέτρησης των σχετικών επιδόσεων για μητρώα με διαφορετικά χαρακτηριστικά. Να είστε προσεκτικοί στην ονομασία των συναρτήσεων που θα υλοποιήσετε: Τα ονόματα όλων των συναρτήσεων που θα κατασκευάσετε θα πρέπει να τελειώνουν με το επίθεμα `_AM` όπου οι θέσεις `AM` θα υποδηλώνουν το ΑΜ σας.

Μην ξεχάσετε:
Σε μία παράγραφο να αναφέρετε όπως και στην πρώτη άσκηση τα χαρακτηριστικά του υπολογιστικού σας συστήματος.

Ερώτημα 1 - Κατασκευή Μητρώων με Ορισμένο Δείκτη Κατάστασης

Θα κατασκευάσετε συνάρτηση που παράγει μητρώα με δεδομένο δείκτη κατάστασης (δ.κ.) ως προς τη νόρμα-2, για τον έλεγχο αλγορίθμων.

1. Θα κατασκευάσετε συνάρτηση `condrand_AM` με ορίσματα `n,kappa` που παράγει μητρώα με δείκτη κατάστασης `kappa`. Θα χρησιμοποιήσετε 2 φορές τη `rand(n)` για να παράγετε 2 τυχαία μητρώο και μετά θα υπολογίσετε την παραγοντοποίηση QR τους. Αν ονομάσετε Q_1 και Q_2 τα 2 ορθογώνια μητρώα που παράγονται, τότε $A = Q_1 D Q_2$ όπου D είναι ένα διαγώνιο μητρώο με δείκτη ακριβώς `kappa`, όπως για παράδειγμα[1].

   $$D = \mathrm{diag}([1, \mathtt{kappa}^{-1/(n-1)}, \mathtt{kappa}^{-2/(n-1)}, \ldots, \mathtt{kappa}^{-1}]).$$

   Να βεβαιωθείτε ότι ο δείκτης κατάστασης του A ως προς τη νόρμα-2 είναι ακριβώς `kappa`.

2. Να σχεδιάσετε και να υλοποιήσετε πρόγραμμα `st_condrand_AM` που παράγει τριδιαγώνια συμμετρικά μητρώα που έχουν δ.κ. ως προς τη νόρμα-2 ακριβώς `kappa`. Υπόδειξη: Χρησιμοποιήστε πρώτα τη συνάρτηση `condrand_AM` που γράψατε παραπάνω και μετά τη συνάρτηση MATLAB `hess`[2] επί του αποτελέσματος. Να αιτιολογήσετε τα βήματα και να βεβαιωθείτε ότι ο δείκτης κατάστασης του A ως προς τη νόρμα-2 είναι ακριβώς `kappa`.

Παρακάτω θα χρησιμοποιήσετε μητρώα που θα παράγετε με αυτόν τον τρόπο για να ελέγξετε τη συμπεριφορά των προγραμμάτων που θα αναπτύξετε. Θα αναφερόμαστε σε αυτά με τον κωδικό $\mathrm{GE}(i)$ για τη γενική κατηγορία (μη τριδιαγώνια) και με $\mathrm{TS}(i)$ για την τριδιαγώνια κατηγορία όπου ο δείκτης i παίρνει τιμές από 1 ως 5 και αντιστοιχεί σε μητρώο με δείκτη κατάστασης $\mathtt{kappa}(i)$ όπου $\mathtt{kappa} = \{1, 10^4, 10^8, 10^{12}, 10^{14}\}$. Για παράδειγμα, το μητρώο $\mathrm{GE}(2)$ θα είναι το γενικό (πυκνό) μητρώο με δ.κ. 10^4 ενώ το $\mathrm{TS}(5)$ θα είναι το τριδιαγώνιο συμμετρικό μητρώο με δ.κ. 10^{14}.

Για κάθε ένα από τα μητρώα, εφόσον μας ενδιαφέρει η επίλυση συστημάτων, θα χρησιμοποιήσετε γνωστό διάνυσμα $x_{\mathrm{sol}} = \mathtt{ones(n,1)}$ και θα υπολογίσετε το δεξιό μέλος $b = Ax_{\mathrm{sol}}$. Επομένως, σε όλες τις περιπτώσεις μπορείτε να υπολογίσετε το σχετικό εμπρός κατάλοιπο και το σφάλμα (το οποίο είναι γνωστό κατ' εξαίρεση, αφού το πρόβλημα είναι «στημένο» και το δεξιό μέλος έχει κατασκευαστεί όπως δείξαμε) καθώς και το εκ των υστέρων πίσω σφάλμα (από τη θεωρία).

[1] Η μέθοδος αυτή για το D είναι από το [Ste96].
[2] Σχετικά με το hess δείτε `help hess`

Ερώτημα 2 - Επαναληπτική μέθοδος αντιστροφής μητρώων

Η πρώτη μέθοδος που εξετάζουμε χρησιμοποιεί την αναδρομή

$$X^{(k+1)} = 2X^{(k)} - X^{(k)}AX^{(k)}, k = 1, ...$$

για την προσέγγιση του A^{-1}. Αξίζει να αναφέρουμε ότι για κατάλληλη αρχικοποίηση, π.χ. $X^{(0)} = \gamma A^\top$ όπου $0 < \gamma < 2/\sigma_{\max}^2$ ($\sigma_{\max}$ είναι η μέγιστη ιδιάζουσα τιμή), η ακολουθία των μητρώων που παράγεται από την αναδρομή [3] (και άλλες παρόμοιοι) τείνουν στο αντίστροφο (ή ψευδοαντίστροφο) ακόμα και όταν το μητρώο είναι χαμηλής τάξης ή μη τετραγωνικό[4]

Να κατασκευάσετε συνάρτηση,

```
[B,res]=Ninv_AM (A,B0,tol,maxiter)
```

όπου `A` και `B0` είναι το μητρώο και μία αρχικοποίηση του αντιστρόφου, `tol` είναι το κατώφλι που ορίζουμε για τη νόρμα $\|B - BAB\|_F$, `tol` είναι το μέγιστο πλήθος επαναλήψεων αντίστοιχα. Η συνάρτηση θα επιστρέφει την απάντηση στο `B` και την καταγραφή του καταλοίπου στο `res` αντίστοιχα. Θα πρέπει να παρουσιάσετε τα αποτελέσματα που παίρνετε όταν εφαρμόζετε τη μέθοδο αυτή στον υπολογισμό του αντιστρόφου των μητρώων $\mathrm{GE}(1)$ ως και $\mathrm{GE}(5)$, μεγέθους `n=40`, με τις επιλογές `tol=1e-6; maxiter=1000;` με τον εξής τρόπο:

Γραφική παράσταση που δείχνει τις τιμές (επανάληψη και `res` ανά βήμα) σε μία γραμμή ανά μητρώο. Ο κατακόρυφος άξονας (τεταγμένων) πρέπει να είναι σε λογαριθμική κλίμακα.

Πίνακας 5 στηλών που περιέχουν: η 1η το όνομα του μητρώου, 2η το δ.κ. $\kappa_2(A)$, 3η το τελικό εμπρός σφάλμα συγκριτικά με το αποτέλεσμα της `pinv(A)` από τη MATLAB (δηλ. όταν υπάρξει σύγκλιση ή όταν φτάσουμε στο μέγιστο αριθμό επαναλήψεων), η 4η την τελική τιμή του $\|B - BAB\|_F$ και η 5η τον αριθμό επαναλήψεων. Προσέξτε ότι συγκρίνουμε με το ψευδοαντίστροφο που υπολογίζεται από τη MATLAB[5].

Τέλος, θα συγκρίνετε την ακρίβεια των αποτελεσμάτων από διάφορους τρόπους υπολογισμού της λύσης ενός συστήματος με παράγοντα το μητρώο, έστω A, από τη συνάρτηση `gfpp(100)` από το Matrix Computation Toolbox που θα αποκαλούμε GF(1). Ως δεξιό μέλος θα χρησιμοποιήσετε το διάνυσμα $b = Ax_1$ όπου `x1 = [1:n]'`. Θα συγκρίνετε το εμπρός σχετικό σφάλμα $\|x1 - x\|/\|x1\|$ καθώς και το σχετικό κατάλοιπο $\|b - Ax\|/\|b\|$ που λαμβάνετε αν η λύση υπολογιστεί με τις εξής μεθόδους (πρέπει να δείξετε τους κώδικές σας[6] και να συμπληρώσετε τον πίνακα). Πρέπει επίσης να σχολιάσετε τα αποτελέσματα.

μέθοδος	σχετικό κατάλοιπο	εμπρός σχετικό σφάλμα
MATLAB \		
MATLAB `LU`		
MATLAB `LU` με 1 βήμα επαναληπτικής εκλέπτυνσης		
MATLAB \ με 2 βήματα επαναληπτικής εκλέπτυνσης		
MATLAB `qr`		
μέσω αντιστρόφου MATLAB με την `inv`		
μέσω αντιστρόφου με τη (`Ninv_AM`)		

[3] Η μέθοδος έχει προταθεί πριν πολλές δεκαετίες. Πολλές φορές αποδίδεται στον G. Shulz (1933), ενώ άλλες φορές στον Hotelling. Η αναδρομή είναι παρόμοια με την αναδρομή Newton που χρησιμοποιείται για να υπολογιστεί το αντίστροφο ενός αριθμού χωρίς διαιρέσεις. Δηλ. η εφαρμογή της Newton για την εύρεση της ρίζας της συνάρτησης $f(x) = ax - 1$ χωρίς να υπολογίσουμε ποτέ το x^{-1}). Μία εκτενής συζήτηση υπάρχει στο σημαντικό βιβλίο του Householder [Hou64], αρνητικά αποτελέσματα στον Stewart [SS74] και μία πρόσφατη υλοποίηση με υπερταχείς πολλαπλασιασμούς μητρώων [SSS13].

[4] Δυστυχώς, υπό κανονικές συνθήκες, το κόστος της αναδρομής μπορεί να είναι μεγάλο και γι' αυτό χρησιμοποιείται (αυτός ή παραλλαγές του) μόνον κάτω από ειδικές συνθήκες. Για σας αυτό δεν έχει σημασία, στόχος είναι να δοκιμάσετε μία απλή στη διατύπωση επαναληπτική μέθοδο και να παρουσιάσετε αποτελέσματα όπως γίνεται σ' αυτές τις περιπτώσεις.

[5] Όταν το μητρώο έχει μεγάλο δ.κ. το πρόβλημα του υπολογισμού είναι ιδιαίτερα ευαίσθητο. Σημειώνουμε ότι στην πράξη, όταν οι τιμές $\|B - BAB\|_F, \|A - ABA\|_F$ θεωρηθούν ικανοποιητικά μικρές και τα μητρώα AB και BA είναι συμμετρικά, τότε το B θεωρείται (ψευδο)αντίστροφο.

[6] Όπου αναφερόμαστε σε κώδικες της MATLAB χρειάζετα μόνον να δείξετε τις γραμμές του κώδικα που πρέπει να γράψετε για να πετύχετε την επίλυση, π.χ. `[L,U]=lu(A); x = U\(L\b);`

Ερώτημα 3 - Επίλυση τριδιαγώνιων συστημάτων: Δομές και αλγόριθμοι

Στην παρακάτω άσκηση είναι σημαντικό να οργανώσετε τον κώδικα ώστε να εξοικονομούνται θέσεις αποθήκευσης χωρίς να αυξάνονται οι πράξεις.

1. Θα εξετάσετε τη χρήση περιστροφών Givens[7] για την επίλυση συστημάτων με τριδιαγώνια μητρώα. Το μητρώο θα δίνεται και θα αποθηκεύεται ως ένας μονοδιάστατος πίνακας για κάθε διαγώνιο, ακριβώς όπως περιγράφεται στο εγχειρίδιο LAPACK για μη συμμετρικά τριδιαγώνια μητρώα και στον αντίστοιχο κώδικα επίλυσης συστημάτων[8].

   Η συνάρτηση που θα γράψετε πρέπει να ονομάζεται `givens_GT_AM` και θα επιστρέφει τα στοιχεία του παράγοντα R στον ίδιο χώρο που δόθηκε για το A ενώ τα $n-1$ ζεύγη των συντελεστών περιστροφής $c^{(k)}, s^{(k)}$ που υπολογίζονται κατά τη διάρκεια της διαδικασίας μπορούν να επιστρέφονται σε ξεχωριστό πίνακα, έστω H, μεγέθους $2 \times (n-1)$. Πρέπει να προσέξετε να αποφεύγονται αδικαιολόγητες υπερχειλίσεις στους υπολογισμούς των παραγόντων της Givens[9].

2. Στη συνέχεια θα χρησιμοποιήσετε τον παραπάνω αλγόριθμο για να κατασκευάσετε έναν λίγο πιο σύνθετο που θα επιτρέπει διαμέριση σε μικρότερα προβλήματα χρησιμοποιώντας τον τύπο SMW (Sherman-Morrison-Woodbury)[10] και ό,τι άλλο γνωρίζετε από το μάθημα. Με τον τρόπο αυτό, η λύση γραμμικού συστήματος με το A θα υπολογίζεται λύνοντας περισσότερα αλλά μικρότερα τριδιαγώνια συστήματα με τον αλγόριθμο που αναπτύξατε στο προηγούμενο υποερώτημα.

   Για παράδειγμα, αν γράψουμε $A = \hat{A} + UV^\top$ όπου

$$\begin{pmatrix} \alpha_{1,1} & \alpha_{1,2} & & & & \\ \alpha_{2,1} & \alpha_{2,2} & \alpha_{2,3} & & & \\ & \alpha_{3,2} & \alpha_{3,3} & \alpha_{3,4} & & \\ & & \alpha_{4,3} & \alpha_{4,4} & \alpha_{4,5} & \\ & & & \alpha_{5,4} & \alpha_{5,5} & \alpha_{5,6} \\ & & & & \alpha_{6,5} & \alpha_{6,6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{1,1} & \alpha_{1,2} & & & & \\ \alpha_{2,1} & \alpha_{2,2} & \alpha_{2,3} & & & \\ & \alpha_{3,2} & \alpha_{3,3} & \alpha_{3,4} & & \\ & & & \alpha_{4,4} & \alpha_{4,5} & \\ & & & \alpha_{5,4} & \alpha_{5,5} & \alpha_{5,6} \\ & & & & \alpha_{6,5} & \alpha_{6,6} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} & & & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \\ & & \alpha_{4,3} & & & \\ & & & & & \\ & & & & & \end{pmatrix}$$

   θα θέτουμε $U = [\alpha_{4,3}e_4], V = [e_3]$. Προσέξτε ότι σύμφωνα με τη θεωρία, εφόσον $\alpha_{4,3} \neq 0$, το $UV^\top$ έχει τάξη 1.

   Συνοψίζοντας, ο αλγόριθμός σας για την επίλυση τριδιαγώνιου συστήματος με Givens ακολουθεί τα βήματα που περιγράφονται στον Αλγόριθμο 1.

Αλγόριθμος 1

Είσοδος: τριδιαγώνιο μητρώο A αποθηκευμένο σε τριδιαγώνια μορφή, διάνυσμα b για δεξιό μέλος, και ακέραιος p που δηλώνει πόσες διαμερίσεις θα γίνουν (αν $p=1$ έχουμε τετριμμένη διαμέριση, δηλ. το σύστημα λύνεται απευθείας με τον αλγόριθμο Givens που αναπτύξατε στο 1ο υποερώτημα).

Έξοδος: λύση x

if `p>0` **then**

Διατύπωση του προβλήματος ως επίλυση συστήματος με μητρώο που προέρχεται από την ανανέωση τάξης $p-1$ ενός απλούστερου μητρώου ώστε να μπορεί να χρησιμοποιηθεί ο τύπος SMW και επίλυση μέσω αυτού και κατά πλοκάδες πίσω αντικατάσταση. Ειδικότερα πρέπει να λύσετε μέσω διαμέρισης και εφαρμογής του τύπου SMW χρησιμοποιώντας διατύπωση όπως στην έκφραση (1). Θα γράψετε $A = \hat{A} + UV^\top$ όπου το μητρώο $\hat{A}$ θα είναι όπως το A και θα περιέχει μηδενικά στις υποδιαγώνιες θέσεις $m+1, 2m+1, ..., (p-1)m+1$ όπου $m = \lceil \frac{n}{p} \rceil$. Π.χ. αν $\mathtt{n} = 100$ και $\mathtt{p} = 5$ τότε η διαμέριση θα γίνει χρησιμοποιώντας για $\hat{A}$ το μητρώο A θέτοντας ίσες με 0 τις θέσεις $21, 41, 61, 81$ οπότε το $UV^\top$ θα περιέχει τις τιμές που μηδενίστηκαν και τα U, V θα αποτελούνται από 4 μόνο στήλες.

else

Επίλυση του $Ax = b$ με Givens.

end if

---

[7]Δείτε την περιγραφή των περιστροφών στη Wikipedia, ή στο βιβλίο, κεφ. 6.

[8]Πρέπει να τον εντοπίσετε στη βιβλιοθήκη με βάση την ονοματολογία που περιγράψαμε στο μάθημα.

[9]Θυμηθείτε την ανάλυση που έγινε στην τάξη για τον αξιόπιστο υπολογισμό της νόρμας-2 διανύσματος.

[10]Δείτε επίσης τη σελίδα στη Wikipedia.

Η διατύπωση του προβλήματος με τρόπο που να διευκολύνει την εφαρμογή του SMW είναι η ακόλουθη:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} A_1 & C_2 & & \\ 0 & A_2 & C_3 & \\ & & \ddots & \ddots \\ & & & A_p \end{pmatrix}}_{\hat{A}} + \underbrace{\alpha_{m+1,m} e_{m+1} e_m^\top + \cdots + \alpha_{(p-1)m+1,(p-1)m} e_{(p-1)m+1} e_{(p-1)m}^\top}_{UV^\top} \tag{1}$$

Στη συνέχεια, ο αλγόριθμος επιλύει το τριγωνικό σύστημα χρησιμοποιώντας την παραπάνω σχέση. Δηλαδή, θέτουμε ως $\hat{A}$ τον πρώτο όρο του αθροίσματος και κάνουμε την κατάλληλη ανάθεση στα U, V ώστε να προκύψουν οι υπόλοιποι όροι του αθροίσματος. Μετά χρησιμοποιείται ο τύπος SMW και λύνεται το σύστημα, αξιοποιώντας τη δομή του $\hat{A}$ (είναι κατά πλοκάδες άνω τριγωνικό, με τριδιαγώνια μητρώα στη διαγώνιο). Ειδικότερα, για να λύσετε με το $\hat{A}$ κάνετε κατά πλοκάδες πίσω αντικατάσταση. Για παράδειγμα, αν $p = 2$ τότε

$$\left(\underbrace{\begin{pmatrix} A_1 & C_2 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}}_{\hat{A}} + \alpha_{m+1,m} e_{m+1} e_m^\top \right) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}$$

οπότε η εφαρμογή του SMW θα γινόταν ως εξής:

Εφαρμογή SMW

υπολογισμός των $[\hat{x}, z] = \hat{A}^{-1}[b, \alpha_{m+1,m} e_{m+1}]$
υπολογισμός του $x = \hat{x} - z(1 - e_m^\top z)^{-1} e_m^\top \hat{x}$

Στο παραπάνω, η επίλυση με το $\hat{A}$ υλοποιείται αξιοποιώντας τη συγκεκριμένη μορφή του μητρώου (κατά πλοκάδες άνω τριγωνικό με τριδιαγώνιες πλοκάδες στη διαγώνιο). Για παράδειγμα, ο υπολογισμός του $\hat{x}$ μπορεί να γίνει ως εξής:

Υπολογισμός $\hat{\mathrm{x}}$

επίλυση $A_2 \hat{x}_2 = b_2$
επίλυση $A_1 \hat{x}_1 = b_1 - C_2 \hat{x}_1$
$\hat{x} = [\hat{x}_1^\top, \hat{x}_2^\top]^\top$

Να δοκιμάσετε τον αλγόριθμό σας στα μητρώα `TS(1), TS(2), TS(4), TS(5)` μεγέθους `n=400` χρησιμοποιώντας $p = 1$ (δηλ. χωρίς διαμέριση, απευθείας με τον αλγόριθμο που αναπτύξατε στο 1ο υποερώτημα), $p = 2$ και $p = 4$ με δεξιά μέλη $b = Ax_{\mathrm{sol}}$ όπου $x_{\mathrm{sol}} =$ `ones(n,1)`. Για κάθε μέθοδο και επίπεδο διαμέρισης να αναφέρετε το εμπρός σφάλμα καθώς και να χρονομετρήσετε (αξιόπιστα) και να αναφέρετε τις επιδόσεις σε δευτερόλεπτα. Υπενθυμίζουμε ότι πρέπει να κάνετε ό,τι μπορείτε για να έχετε καλή επίδοση με το προβλεπόμενο σφάλμα.

Τρόπος Παράδοσης Εργασίας

Παραδοτέα: Αναφορά (σε μορφή pdf) και κώδικας της άσκησης συμπιεσμένα σε αρχείο zip με ονομασία **AM_prb3_2014** π.χ. **3948_prb3_2014**.

Παράδοση & Αποστολή: Το συμπιεσμένο αρχείο παραδίδεται μέσω της πλατφόρμας e-class ενώ υποχρεούστε να παραδώσετε και εκτυπωμένη αναφορά, **για την παράδοση της οποία θα υπάρξει σύντομα ειδική ανακοίνωση.**

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`.

ΠΡΟΣΟΧΗ: Υπενθυμίζουμε τη σημασία που έχει η ατομική σας προσπάθεια στην επίλυση για την επιτυχημένη ολοκλήρωσή του μαθήματος. Εμείς θεωρούμε ότι οι ασκήσεις που παραδίδονται είναι αποτέλεσμα προσωπικής προσπάθειας του φοιτητή που την υπογράφει και που φέρει την ευθύνη να απαντήσει αν του ζητηθεί να αιτιολόγησει και να υποστήριξει όσα γράφονται. Ένα επιπλέον κέρδος είναι ότι η τελική εξέταση μπορεί πάντα να εξαρτάται από τις γνώσεις που αποκτήσατε στην προετοιμασία των ασκήσεων.

ΚΑΛΕΣ ΓΙΟΡΤΕΣ !!!

Αναφορές

[Hou64] A. S. Householder. *The Theory of Matrices in Numerical Analysis.* Dover Pub., New York, 1964.

[SS74] T. Soderstrom and G. W. Stewart. On the numerical properties of an iteration for computing the moore-penrose generalized inverse. *SIAM J. Numer. Anal.*, 11:61–74, 1974.

[SSS13] P. Sanders, J. Speck, and R. Steffen. Work-efficient matrix inversion in polylogarithmic time. In *Proceedings of the 25th ACM Symposium on Parallelism in Algorithms and Architectures*, SPAA '13, pages 214–221, New York, NY, USA, 2013. ACM.

[Ste96] G.W. Stewart. *Afternotes on Numerical Analysis.* SIAM, 1996.