Επιστημονικοί Υπολογισμοί (ή Υπολογιστική Επιστήμη)

Ασχολούνται με την κατασκευή μαθηματικών μοντέλων και με τεχνικές ποσοτικής ανάλυσης και τη χρήση υπολογιστών για την ανάλυση και την επίλυση επιστημονικών προβλημάτων.

Στην πράξη, είναι συνήθως η εφαρμογή της προσομοίωσης σε υπολογιστή και άλλες μορφές υπολογισμού από την αριθμητική ανάλυση και την θεωρητική επιστήμη των υπολογιστών για την επίλυση προβλημάτων σε διάφορους επιστημονικούς κλάδους.

Συχνά τα μαθηματικά μοντέλα απαιτούν για την προσομοίωσή τους ένα τεράστιο πλήθος υπολογισμών (συνήθως floating-point) και γι αυτό εκτελούνται σε υπερυπολογιστές ή κατανεμημένους υπολογιστές.

Η Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα είναι μια σημαντική υποστήριξη για τις τεχνικές που χρησιμοποιούνται στους Επιστημονικούς Υπολογισμούς.

<u>Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα</u>

Ανάπτυξη και μελέτη αλγορίθμων για την εκτέλεση υπολογισμών της Γραμμικής Άλγεβρας(δηλ. υπολογισμών Πινάκων) σε υπολογιστές.

Οι υπολογισμοί πινάκων αποτελούν συχνά ένα βασικό τμήμα(πυρήνας) των προβλημάτων της Υπολογιστικής Επιστήμης και Τεχνολογίας(όπως είναι η Επεξεργασία Εικόνας και Σήματος, Υπολογιστική Οικονομία, Προσομοίωση, Δομημένη Βιολογία, Βιοπληροφορική, Μετεωρολογία, Ρευστοδυναμική, κ.α.).

<u>Περιεχόμενα</u>

1. **Σφάλματα στους Αριθμητικούς Υπολογισμούς**
   με αριθμούς σε παράσταση κινητής υποδιαστολής (π.χ. μετάδοση σφάλματος στο εσωτερικό γινόμενο διανυσμάτων).
2. **Άμεσοι (ή απευθείας) μέθοδοι για την επίλυση Γραμμικών Συστημάτων**
   με γνωστό πλήθος βημάτων και σφάλμα οφειλόμενο μόνο στη στρογγύλευση λόγω του υπολογιστικού μέσου (π.χ. μέθοδος απαλοιφής του Gauss).
3. **Επαναληπτικές μέθοδοι για την επίλυση Γραμμικών Συστημάτων**
   με κριτήριο διακοπής, άγνωστο πλήθος βημάτων και σφάλμα οφειλόμενο όχι μόνο λόγω της στρογγύλευσης αλλά και λόγω της αποκοπής του υπολογιστικού τύπου.
4. **Αριθμητικός υπολογισμός Ιδιοτιμών και Ιδιοδιανυσμάτων** ενός πίνακα
5. **Βασικά στοιχεία αριθμητικής επίλυσης Μερικών Διαφορικών Εξισώσεων.**

Προβλήματα της Αριθμητικής Γραμμικής Άλγεβρας

1. Πρόβλημα επίλυσης Γραμμικού Συστήματος

   Δίνονται A $n \times n$ μη ιδιάζων (αντιστρέψιμος $\Leftrightarrow \det(A) \neq 0$) και b ένα n-διάστατο διάνυσμα. Να βρεθεί το n-διάστατο διάνυσμα x τέτοιο ώστε $Ax = b$.

   Γενικά: $\underset{nxn}{A}\ \underset{nxm}{X} = \underset{nxm}{B}$, $X = (x_1, x_2, ..., x_n)^T$, $B = (b_1, b_2, ..., b_n)$

   (όπου $x^T \rightarrow$ διάνυσμα γραμμή)

   Σχετικά προβλήματα:
   - Αντιστροφή πίνακα
   - Τάξη(rank) πίνακα (*πλήθος γραμμικά ανεξάρτητων γραμμών ή στηλών*)
   - Εύρεση ορίζουσας
   - Κύριες υπερέχουσες, ελάσσονες ορίζουσες
   - Ορθογώνια βάση του ***R****ange* του $\underset{mxn}{A}$: $\boldsymbol{R}(A) = \{b \in R^m \mid b = \underset{mxn}{A}\ \underset{nx1}{x}\ ,\ x \in R^m\}$
   - Μηδενοχώρος (***N****ull space*) $\boldsymbol{N}(A) = \{x \in R^n \mid Ax = 0\}$
   - Διάφοροι πίνακες προβολής του A

   Κύρια πηγή: Αριθμητική επίλυση διαφορικών εξισώσεων

2. Πρόβλημα των ελαχίστων τετραγώνων

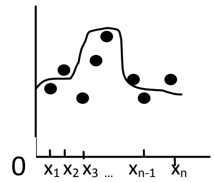
   $$\text{Δίνονται} \left.\begin{array}{l} A\ \ m \times n \text{ πίνακας} \\ b\ \ n - \text{διάστατο διάνυσμα} \end{array}\right\} \Rightarrow \text{να βρεθεί}$$

   $$n - \text{διάστατο διάνυσμα x τέτοιο ώστε: } \Big\| \underbrace{Ax - b}_{\upsilon\pi\acute{o}\lambda o\iota\pi o} \Big\|_2 \rightarrow \text{ελάχιστο}$$

   Σχετικά προβλήματα:

   Εφαρμογές στη στατιστική και στη γεωμετρία

   $$\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 ... + \varepsilon_n^2 \rightarrow \min \;\; \Leftrightarrow \;\; \|\varepsilon\|_2^2 \rightarrow \min$$

3. Πρόβλημα ιδιοτιμών

   Δίνεται ο $n \times n$ πίνακας A: Να βρεθούν n βαθμωτά λ και μη μηδενικά n διανύσματα x: $Ax = \lambda x$ *[*πίνακας A επί διάνυσμα x ($O(n^2)$), αριθμός λ επί διάνυσμα x ($O(n)$) $\rightarrow$ μείωση πολυπλοκότητας κατά μία τάξη*]*.

   Σχετικά προβλήματα: Επίλυση και ανάλυση της ευστάθειας ενός ομογενούς συστήματος 1ης τάξης διαφορικών εξισώσεων.

   Εφαρμογές:

   • Ανάλυση αποθεμάτων αγοράς

   • Μελέτη συμπεριφοράς δυναμικών συστημάτων

4. <u>Γενικευμένο πρόβλημα ιδιοτιμών</u>
   Δίνονται οι $n\times n$ πίνακες A και B και ζητείται να βρεθούν βαθμωτά(πραγματικός ή μιγαδικός) λ και μη μηδενικά $n-$ διάστατα διανύσματα x: $Ax=\lambda Bx$

   Πηγή: Ανάλυση ταλάντωσης ή παλμού χωρίς απόσβεση, η οποία μοντελοποιείται σε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων 2ης τάξης, της μορφής $B\dfrac{d^2z}{dt^2}+Az=0$

5. <u>Πρόβλημα Τετραγωνικής Ιδιοτιμής</u>
   Δίνονται οι $n\times n$ πίνακες A,B,C. Ζητούνται να βρεθούν βαθμωτά λ και μη μηδενικά $n-$ διάστατα διανύσματα x: $(\lambda^2A+\lambda B+C)x=0$

   Πηγή: Ανάλυση ταλάντωσης ή παλμού με απόσβεση, η οποία μοντελοποιείται σε ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων 2ης τάξης, της μορφής $A\dfrac{d^2z}{dt^2}+B\dfrac{dz}{dt}+C=0$

6. <u>Πρόβλημα διάσπασης(ή διαχωρισμού) σε Ιδιάζουσες Τιμές (Singular Value Decomposition ή διάσπαση SVD)</u>
   Δίνεται $m\times n$ πίνακας A και ζητούνται να βρεθούν ορθογώνιοι πίνακες U και V (X ορθογώνιος $\Leftrightarrow X^TX=I \Leftrightarrow X^{-1}=X^T$) και διαγώνιος πίνακας Σ: $\mathrm{A}=U\Sigma V^T$,
   όπου

$$\Sigma=\begin{pmatrix}\sigma_1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_n\end{pmatrix} \text{ και } \sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n \text{ οι ιδιάζουσες τιμές του } \Sigma.$$

Εφαρμογές:

- Θεωρία ελέγχου συστημάτων
- Βιοϊατρική
- Επεξεργασία σήματος και εικόνας
- Στατιστικές εφαρμογές

Μετασχηματισμοί πινάκων

$Ax = b$ — Ισοδυναμίας

$Ax = \lambda x$ — Ομοιότητας → Περιστροφής(Givens), Ορθογώνιοι(Householder)

$$Ax = b \Leftrightarrow \ldots \Leftrightarrow Ux = c$$

$$A_1 = A \to A_2 \to A_3 \to \ldots \to A_n = U$$

$$A_1 = A \to A_2 \to A_3 \to \ldots \to A_k = \overbrace{\begin{pmatrix} \bullet & \bullet & & & 0 \\ \bullet & \bullet & \bullet & & \\ & \bullet & \bullet & \bullet & \\ & & \bullet & \bullet & \bullet \\ 0 & & & \bullet & \bullet \end{pmatrix}}^{\text{τριδιαγώνιος}} \quad \acute{\eta} \quad D = \begin{pmatrix} \bullet & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \bullet \end{pmatrix}$$

Πίνακας A $n \times n$

Η **πυκνότητα(density)** $d(A)$ ενός πίνακα A ορίζεται ως ο λόγος του πλήθους $n_{nz}(A)$ των μη μηδενικών στοιχείων του A προς το συνολικό πλήθος n^2 των στοιχείων του, δηλ. $d(A) = \dfrac{n_{nz}(A)}{n^2}$

Χαρακτηρισμός πίνακα

- Πυκνός ή Αραιός
- Συμμετρικός ($A^T = A$) ή μη Συμμετρικός.
- *Παρατήρηση*

  $Ax = b \Rightarrow A^T Ax = A^T b$ τότε ο πίνακας $B = A^T A$ είναι συμμετρικός (πράγματι $B^T = (A^T A)^T = A^T (A^T)^T = A^T A = B$).

<u>Μαθηματικό λογισμικό για προβλήματα της Αριθμητικής Γραμμικής Άλγεβρας</u>

- <u>LINPACK(Linear):</u> Συλλογή (ή πακέτο) υποπρογραμμάτων σε FORTRAN για την επίλυση γραμμικών συστημάτων. Είναι σχεδιασμένα ώστε να είναι ανεξάρτητα της μηχανής, πλήρως μεταφερόμενα(portable) και να τρέχουν με περίπου βέλτιστη αποδοτικότητα στα περισσότερα υπολογιστικά περιβάλλοντα.

- <u>EISPACK(Eigenvalues)</u>: Πακέτο υποπρογραμμάτων για τον υπολογισμό του ιδιοσυστήματος ενός πίνακα.
  -Υπολογισμός των ιδιοτιμών και των ιδιοδιανυσμάτων ενός πίνακα
  -Επίλυση του γενικευμένου προβλήματος ιδιοτιμών ($Ax = \lambda Bx, \ \ A, B$ πραγματικοί)
  -Διάσπαση πίνακα σε ιδιάζουσες τιμές (SVD).

- <u>LAPACK(Linear Algebra):</u> Δημιουργία blocks στους αλγορίθμους της Αριθμητικής Γραμμικής Άλγεβρας. Έχει 3 επίπεδα BLAS (Basic Linear Algebra Subroutines)
  -<u>*Επίπεδο 1*</u> BLAS_1: για πράξεις διάνυσμα με διάνυσμα (της μορφής $y = \alpha x + \beta$, x, y διανύσματα , α, β βαθμωτά)
  -<u>*Επίπεδο 2*</u> BLAS_2: για πράξεις πίνακα με διάνυσμα (της μορφής $y = \alpha Ax + y$, A πίνακας)
  -<u>*Επίπεδο 3*</u> BLAS_3: για πράξεις πίνακα με πίνακα (της μορφής $C = \alpha AB + \beta C$, A, B, C πίνακες)

  Είναι μια βιβλιοθήκη από υποπρογράμματα σε FORTRAN77 για την επίλυση των περισσοτέρων προβλημάτων της Αριθμητικής Γραμμκής Άλγεβρας. Σχεδιάσθηκε για την αντικατάσταση του λογισμικού των LINPACK και EISPACK με στόχο την πολύ μεγάλη αποδοτικότητα σε διανυσματικούς επεξεργαστές(vector processors), σε υψηλής επίδοσης σταθμούς εργασίας(workstations) ή σε πολυεπεξεργαστές με κοινά διαμοιραζόμενη μνήμη.

- <u>NETLIB(Network Library)</u>: είναι μια βιβλιοθήκη δικτύου(με ηλεκτρονικά διαθέσιμα τα υποπρογράμματα των LINPACK,EISPACK,LAPACK μαζί με κάποιους άλλους τύπους λογισμικού για υπολογισμούς πινάκων).

- <u>NAG(Numerical Algorithm Group)</u>: αυτή η ομάδα έχει αναπτύξει μια μεγάλη βιβλιοθήκη λογισμικού που περιέχει προγράμματα για πολλά υπολογιστικά περιβάλλοντα όπως:
  -Προβλήματα αριθμητικής γραμμικής άλγεβρας
  -Αριθμητικά προβλήματα διαφορικών εξισώσεων (συνήθων και μερικών)
  -Προβλήματα βελτιστοποίησης
  -Προβλήματα ολοκληρωτικών εξισώσεων
  -Στατιστικά προβλήματα κ.α.

- <u>IMSL(International Mathematical and Statistical Library)</u>
  Η βιβλιοθήκη αυτή περιέχει προγράμματα για σχεδόν όλους τους μαθηματικούς και στατιστικούς υπολογισμούς.

- <u>MATLAB(Matrix Laboratory)</u> Εργαστήριο πινάκων : είναι ένα διαλογικό υπολογιστικό σύστημα σχεδιασμένο για να διευκολύνει τους υπολογισμούς με διάφορους πίνακες βασικών επιστημονικών προβλημάτων και προβλημάτων μηχανικής. Η MATLAB εξασφαλίζει εύκολη προσπέλαση στο λογισμικό πινάκων σχεδιασμένο με το λογισμικό LINPACK και EISPACK. Είναι ένα εξαιρετικά χρήσιμο και πολύτιμο πακέτο για τον έλεγχο αλγορίθμων για μικρά προβλήματα και για χρήση στην αίθουσα διδασκαλίας. Έχει γίνει ένα απαραίτητο εργαλείο για την διδακτική εφαρμογή και στην Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα. Ένα αξιοσημείωτο χαρακτηριστικό της MATLAB είναι οι δυνατότητες των γραφικών της.

- <u>MATLAB codes and MATCOM</u>
  MATCOM : είναι ένα διαλογικό πακέτο εργαλείων λογισμικού της MATLAB για την υλοποίηση όλων των κυριότερων αλγορίθμων για το ίδιο πρόβλημα.

- <u>ACM Library(Association for Computing Machinery)</u>
  Η βιβλιοθήκη αυτή περιέχει προγράμματα για βασικές πράξεις πινάκων, γραμμικά συστήματα και σχετικά προβλήματα με μη γραμμικά συστήματα (ρίζες πολυωνύμων κ.α.)

- <u>ITRACK(Iterative Software Package)</u>
  Σχεδιάσθηκε για την επίλυση γραμμικού συστήματος $Ax = b$ με διάφορες επαναληπτικές μεθόδους (όπου ο πίνακας A είναι μεγάλος και αραιός).

<u>Ανάλυση σφάλματος των αριθμών σε παράσταση με κινητή υποδιαστολή(floating point)</u>

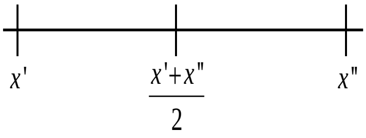
Κάθε πραγματικός αριθμός x αναπαρίσταται με κινητή υποδιαστολή με την ακόλουθη μορφή

$$x = \pm(0.a_1 a_2 ... a_k a_{k+1} ...)_\beta \beta^e, \ \ a_1 \neq 0, \ \ (\beta \text{ άρτιος}),$$

Υπολογιστική λέξη : πεπερασμένου μήκους με k ψηφία(bits) στη mantissa

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \pm & \overset{mantissa\,(\text{σημαντικό τμήμα})}{\underbrace{\overline{x}}_{k \text{ bits}}} & e \\ 0+,1- & & \varepsilon\kappa\theta\acute{\varepsilon}\tau\eta\varsigma \\ \hline \end{array}$$

Ο πραγματικός αριθμός x αντιστοιχίζεται με τον πλησιέστερο αριθμό μηχανής $fl(x)$ με την τεχνική της στρογγύλευσης, ως ακολούθως



όπου $fl(x) = \begin{cases} x', \text{ αν } x < \dfrac{x'+x''}{2} \\ x'', \text{ αν } x \geq \dfrac{x'+x''}{2} \end{cases}$

όπου x', x'' είναι δύο γειτονικοί αριθμοί μηχανής

Απόλυτο σφάλμα: $|x - fl(x)|$

Απόλυτο σχετικό σφάλμα: $\dfrac{|x - fl(x)|}{x} \leq \dfrac{1}{2}\beta^{-k+1} = u$ (***μονάδα σφάλματος στρογγύλευσης***)

Θέτουμε $\varepsilon = \dfrac{fl(x) - x}{x} \Leftrightarrow fl(x) = x\varepsilon + x = x(1+\varepsilon)$, όπου $|\varepsilon| \leq u$

Η ποσότητα ε (λέγεται **μονάδα μηχανής**) και είναι ο μικρότερος θετικός αριθμός τέτοιος ώστε $1 + \varepsilon \neq 1$.

Στη συνέχεια διατυπώνονται τρία σημαντικά λήμματα πολύ χρήσιμα στην ανάλυση σφάλματος στους αριθμητικούς υπολογισμούς.

<u>Βοηθητικά λήμματα</u>

<u>Λήμμα 1:</u> Αν $0 \leq u < 1$ και $n = 1,2,3,\ldots \Rightarrow 1 - nu \leq (1-u)^n$

<u>Λήμμα 2:</u> Αν $n = 1,2,3\ldots$ και $0 \leq nu \leq 0.01 \Rightarrow (1+u)^n \leq 1 + 1.01nu$

<u>Λήμμα 3:</u> Αν $|\varepsilon_i| \leq u$ για $\text{i} = 1,2,\ldots,n$ και $nu \leq 0.01 \Rightarrow 1 - nu \leq \prod_{i=1}^{n}(1+\varepsilon_i) \leq 1 + 1.01nu$

Πράγματι: $1 - nu \overset{\text{λήμμα 1}}{\leq} (1-u)^n \leq \prod_{i=1}^{n}(1+\varepsilon_i) \leq (1+u)^n \overset{\text{λήμμα 2}}{\leq} 1 + 1.01nu$

Παρατήρηση: $\left.\begin{array}{l} \text{Ορίζουμε } k_1 : \underbrace{\dfrac{1}{2}\beta^{1-k_1}}_{u_1} = 1.01\underbrace{\dfrac{1}{2}\beta^{1-k}}_{u} \\ \text{Δηλαδή } u_1 = 1.01u \end{array}\right\} \Leftrightarrow k_1 = k - \log_2 1.01$

Με τη βοήθεια του προηγούμενου ορισμού ανισότητες της μορφής $(1-u)^n \leq 1 + \varepsilon \leq (1+u)^n$ μπορούν να αντικατασταθούν με την ανισότητα $|\varepsilon| \leq nu_1$, όπου n το μέγεθος του προβλήματος (π.χ. το πλήθος αριθμών που προστίθενται).