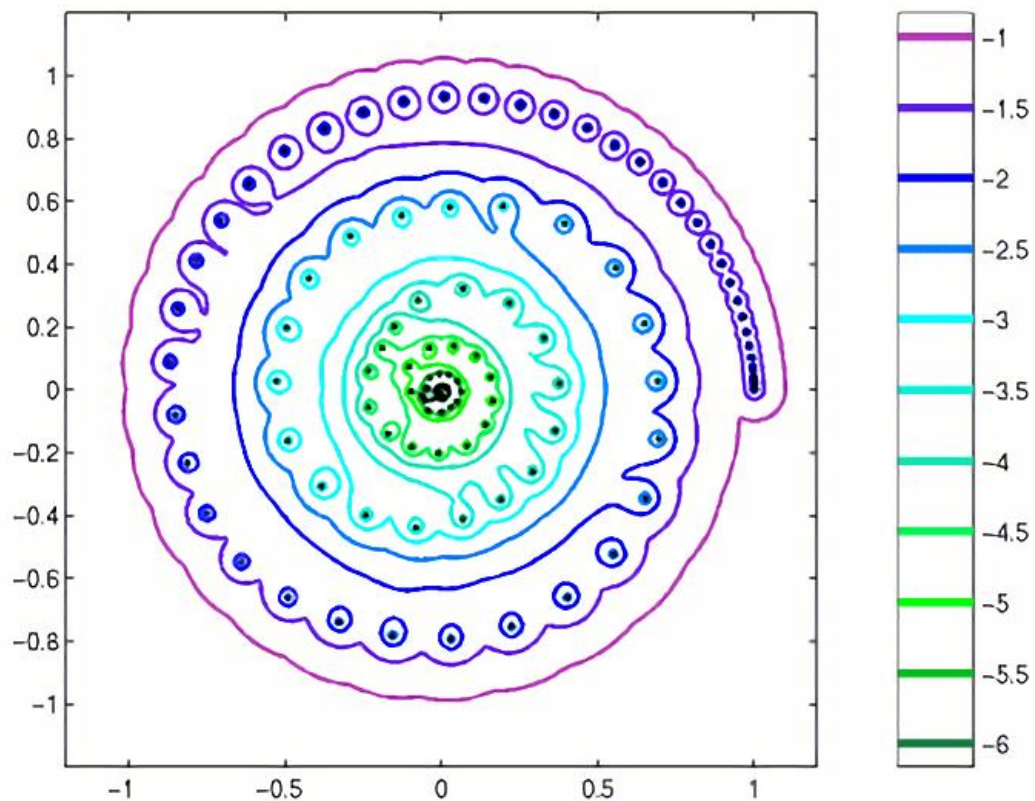




ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΨΕΥΔΟΦΑΣΜΑΤΟΣ ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΩΝ ΠΙΝΑΚΩΝ

ΑΛΕΞΑΝΔΡΑ Ρ. ΔΕΣΥΠΡΗ

Επιβλέπων Καθηγητής: ΠΑΝΑΓΙΩΤΗΣ Ι. ΨΑΡΡΑΚΟΣ



ΑΘΗΝΑ, ΙΟΥΝΙΟΣ 2018



ΑΛΓΟΡΙΘΜΙΚΟΣ ΣΧΕΔΙΑΣΜΟΣ ΨΕΥΔΟΦΑΣΜΑΤΟΣ ΤΕΤΡΑΓΩΝΙΚΩΝ ΠΙΝΑΚΩΝ

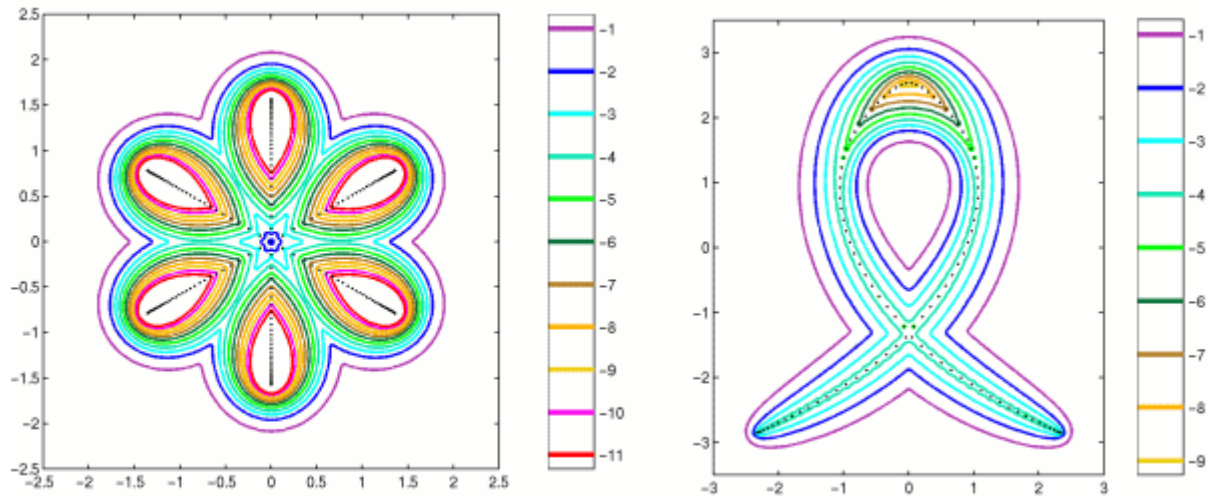
ΑΛΕΞΑΝΔΡΑ Ρ. ΔΕΣΥΠΗΡΗ

Εξεταστική επιτροπή:

Β. ΚΑΝΕΛΛΟΠΟΥΛΟΣ, Αναπλ. Καθηγητής ΕΜΠ

Π. ΣΤΕΦΑΝΕΑΣ, Επίκ. Καθηγητής ΕΜΠ

Π. ΨΑΡΡΑΚΟΣ, Καθηγητής ΕΜΠ (Επιβλέπων)



ΑΘΗΝΑ, ΙΟΥΝΙΟΣ 2018

Περιεχόμενα

Abstract	1
1. Εισαγωγή.....	2
2. Θεωρητικό Υπόβαθρο.....	5
2.1 Διαταραχές πινάκων και Ιδιοτιμές	5
2.2 Παραγοντοποίηση Ιδιάζουσων Τιμών (SVD)	8
2.3 Ψευδοφάσμα πίνακα	9
3. Ο αλγόριθμος GRID	19
3.1 Ανάλυση και υλοποίηση	22
3.2 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση Εκτέλεσης.....	23
4. Ο αλγόριθμος Inclusion-Exclusion: Βελτίωση του αλγορίθμου GRID.....	28
4.1 Ανάλυση βημάτων και υλοποίηση.....	32
4.2 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση εκτέλεσης.....	34
5. Ο αλγόριθμος Path-Following του Brühl.....	40
5.1 Ανάλυση και υλοποίηση	41
5.1.1 Ανάλυση της Newton-Raphson στη συγκεκριμένη περίπτωση.....	42
5.1.2 Η μέθοδος Πρόβλεψης-Διόρθωσης	43
5.2 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση εκτέλεσης.....	45
6. Ο αλγόριθμος “Cobra” – Επέκταση του αλγορίθμου Path-Following	51
6.1 Ανάλυση βημάτων – Υλοποίηση αλγορίθμου	51
6.1.1 Η διαδικασία εύρεσης των ζ_j προσεγγίσεων και η διόρθωσή τους.....	52
6.2 Πολυπλοκότητα	54
6.3 Αριθμητικά παραδείγματα – Σύγκριση με τον αλγόριθμο Path-Following.....	56
7. Ο αλγόριθμος Fast Descent – Βελτίωση της ιδέας του path following	60
7.1 Ανάλυση και υλοποίηση	61
7.1.1 Προσαρμογή του αριθμού υπολογιζόμενων σημείων καμπύλης.....	63
7.2 Πολυπλοκότητα	64
7.3 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση εκτέλεσης.....	65
8. Συμπεράσματα	69
9. Μελλοντικοί προβληματισμοί	74
Βιβλιογραφία	75
Πίνακας Εικόνων	76
Πίνακας Πινάκων.....	78

Abstract

Στη συγκεκριμένη διπλωματική εργασία θα ασχοληθούμε με αλγόριθμους εύρεσης του ψευδοφάσματος τετραγωνικών πινάκων. Αρχικά, στο Κεφάλαιο 2 μελετάμε σύντομα το θεωρητικό υπόβαθρο της έννοιας του ψευδοφάσματος και τον ορισμό του. Στη συνέχεια του κεφαλαίου αναφέρουμε ορισμένα βασικά θεωρήματα που αφορούν το ψευδοφάσμα, μαζί με τις αποδείξεις τους και τις ειδικές περιπτώσεις που δεν είναι άλλες από τις ιδιοτιμές. Όσον αφορά τους αλγόριθμους, εξετάζουμε δύο κατηγορίες. Η πρώτη κατηγορία είναι οι αλγόριθμοι grid, με τον βασικό να μελετάται στο Κεφάλαιο 3 και μια βελτίωσή του, των Κούτη και Γαλλόπουλου στο Κεφάλαιο 4. Η δεύτερη κατηγορία είναι οι αλγόριθμοι path-following. Ο πρώτος αλγόριθμος αυτής της κατηγορίας αναπτύχθηκε από τον Martin Brühl και μελετάται στο Κεφάλαιο 5. Τέλος, στα Κεφάλαια 6 και 7 μελετώνται δύο βελτιώσεις του αλγορίθμου αυτού, οι αλγόριθμοι Cobra και Fast Descent, που αναπτύχθηκαν από τους Μπέκα και Γαλλόπουλο. Αφού μελετηθεί ο κάθε αλγόριθμος ξεχωριστά καταλήγουμε στη σύγκριση της εκτέλεσής τους και το χρόνο που χρειάστηκε σε κάθε περίπτωση, σημειώνοντας τα μειονεκτήματα που διορθώνονται αλλά και τα πλεονεκτήματα καθενός από αυτούς.

1. Εισαγωγή

Η μελέτη των ιδιοτιμών τετραγωνικών πινάκων είναι ένα ιδιαίτερα σημαντικό κεφάλαιο της Ανάλυσης Πινάκων και αποτελεί το κυριότερο μέσο με το οποίο διαπιστώνονται οι ιδιότητες κάθε πίνακα ή τελεστή. Εντούτοις τα αποτελέσματα της μελέτης των ιδιοτιμών ενδέχεται να είναι παραπλανητικά και οι υποθέσεις να μην συμφωνούν με τις πειραματικές παρατηρήσεις. Αυτό συμβαίνει σε περιπτώσεις όπου οι ιδιοτιμές παρουσιάζουν ασυνήθιστες ιδιότητες και συμπεριφορά, σε σχέση με τη νόρμα πίνακα με βάση την οποία υπολογίστηκαν. Η νόρμα πινάκων που χρησιμοποιείται στις περισσότερες περιπτώσεις είναι η φασματική (νόρμα-2), η νόρμα δηλαδή που επάγεται από την Ευκλείδεια διανυσματική νόρμα. Με βάση τη συγκεκριμένη νόρμα, το πρόβλημα που αναφέραμε προηγουμένως συνεπάγεται ότι ο πίνακας είναι μη-κανονικός, δεν ισχύει δηλαδή η γνωστή ισότητα $\mathbf{A}\mathbf{A}^* = \mathbf{A}^*\mathbf{A}$ και επίσης τα ιδιοδιανύσματά του δεν είναι ορθογώνια.

Η μελέτη μη-κανονικών πινάκων είναι πολύ σημαντική και συναντάται συχνά σε πολλούς επιστημονικούς τομείς, εκτός από τη Θεωρητική Ανάλυση Πινάκων. Όσον αφορά τους μαθηματικούς τομείς μη-κανονικοί πίνακες συναντώνται ενδεικτικά στη Συναρτησιακή Ανάλυση, στην Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα, στις Στοχαστικές Ανεξίξεις στη θεωρία Μαρκοβιανών αλυσίδων καθώς και στη μελέτη των Διαφορικών Εξισώσεων και, μεταξύ άλλων, των αριθμητικών τρόπων επίλυσής τους. Επιπλέον, τα μαθηματικά των μη-κανονικών πινάκων έχουν εφαρμογή σε επιστήμες όπως η Ρευστομηχανική και η Υδροδυναμική, η Μετεωρολογία και η επιστήμη των Laser. Συνεπώς η επιτακτική ανάγκη μελέτης των ιδιοτήτων τους οδήγησε στο ορισμό του ε-ψευδοφάσματος (ή απλώς ψευδοφάσματος) ενός πίνακα, μιας γραφικής και αναλυτικής εναλλακτικής στη μελέτη των ιδιοτιμών.

Το ε-ψευδοφάσμα $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ ενός τετραγωνικού πίνακα \mathbf{A} είναι ένα σύνολο του μιγαδικού επιπέδου το οποίο περιλαμβάνει τις ιδιοτιμές του πίνακα καθώς και τιμές οι οποίες είναι «σχεδόν» ιδιοτιμές. Πρόκειται για μια επέκταση του φάσματος (του συνόλου δηλαδή των ιδιοτιμών) για να καλύψει σταδιακά ολόκληρο το μιγαδικό επίπεδο και αποτελείται από τις ιδιοτιμές των διαταραχών του \mathbf{A} , δηλαδή των πινάκων $\mathbf{A} + \mathbf{E}$, όπου \mathbf{E} ένας πίνακας με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$, για κάποιον μη αρνητικό αριθμό ε .

Συμπεραίνουμε άρα ότι το φάσμα αποτελεί ειδική περίπτωση του ψευδοφάσματος για $\varepsilon = 0$.

Είναι προφανές ότι υπάρχουν άπειροι τέτοιοι πίνακες \mathbf{E} για κάθε τιμή του ε , γεγονός που δηλώνει ότι το ψευδοφάσμα δεν μπορεί να προσδιοριστεί επαρκώς χωρίς τη βοήθεια υπολογιστή και γι' αυτό ανά τα χρόνια έχουν αναπτυχθεί πολλές μέθοδοι και αλγόριθμοι υπολογισμού του.

Οι αλγόριθμοι αυτοί έχουν στόχο την γραφική απεικόνιση του ψευδοφάσματος, την εύρεση δηλαδή του συνόρου του, $\partial\Lambda_\varepsilon$, για κάθε τιμή του ε και κατατάσσονται σε δύο βασικές κατηγορίες.

Η πρώτη κατηγορία είναι οι αλγόριθμοι Grid. Οι συγκεκριμένοι αλγόριθμοι επιλέγουν ένα πλέγμα του μιγαδικού επιπέδου και αποφαινόμενοι αν τα σημεία του ανήκουν στο ψευδοφάσμα εξετάζοντάς τα ένα προς ένα. Πρόκειται για εξαιρετικά απλούς και σταθερούς αλγορίθμους με εγγυημένα σωστά αποτελέσματα, οι οποίοι όμως παρουσιάζουν ορισμένα βασικά μειονεκτήματα, κυριότερο των οποίων είναι ποια και πόσα σημεία του μιγαδικού επιπέδου θα εξεταστούν. Όπως θα δούμε στη συνέχεια, ο αριθμός των εξεταζόμενων σημείων αποτελεί την κύρια παράμετρο αύξησης του χρονικού κόστους του αλγορίθμου. Συνεπώς το πλέγμα από το οποίο θα ξεκινήσουμε πρέπει να βεβαιωθούμε ότι περιέχει το ψευδοφάσμα και ταυτόχρονα το προσεγγίζει σε ικανοποιητικό βαθμό έτσι ώστε να μην οδηγηθούμε σε αχρείαστα μεγάλο αριθμό υπολογισμών, κάτι που όπως θα δούμε τις περισσότερες φορές είναι αρκετά δύσκολο και συνήθως το αρχικό πλέγμα είναι πολύ μεγαλύτερο από το ψευδοφάσμα. Για την μείωση του χρόνου εκτέλεσης σε αυτή την περίπτωση, χωρίς να επηρεάζεται η απλότητα της ιδέας, αναπτύχθηκαν, όπως θα δούμε, ορισμένες μέθοδοι αποκλεισμού των σημείων του πλέγματος τα οποία δεν ανήκουν στο ψευδοφάσμα και άρα δεν είναι αναγκαίο να εξεταστούν.

Η δεύτερη κατηγορία αποτελείται από τους αλγορίθμους Path-Following. Σε αυτή την περίπτωση ο αλγόριθμος ξεκινά βρίσκοντας ένα σημείο του επιπέδου το οποίο ανήκει στην καμπύλη $\partial\Lambda_\varepsilon$ και στη συνέχεια υπολογίζει το επόμενο του κ.ο.κ, προβλέποντας κάθε φορά το επόμενο σημείο και διορθώνοντας την πρόβλεψη. Τελικά ο αλγόριθμος υπολογίζει ολόκληρο το σύνορο του ψευδοφάσματος έχοντας ακολουθήσει το μονοπάτι που ορίζουν οι υπολογισμοί των σημείων. Το πρώτο σημείο βρίσκεται συνήθως ξεκινώντας από μια τυχαία ιδιοτιμή του πίνακα, η οποία σίγουρα θα ανήκει στο εσωτερικό του ψευδοφάσματος, και ακολουθώντας μια συγκεκριμένη κατεύθυνση. Η ιδέα του path-following μειώνει σημαντικά το χρόνο εκτέλεσης σε σχέση με τους αλγορίθμους Grid, αλλά έχει και αυτή ορισμένα βασικά μειονεκτήματα. Το μεγαλύτερο πρόβλημα παρουσιάζεται, όπως θα δούμε, όταν το ψευδοφάσμα δεν είναι συνεκτικό σύνολο, κάτι που συμβαίνει στις περισσότερες περιπτώσεις για μικρές τιμές του ε . Εκ φύσεως οι αλγόριθμοι που ανήκουν σε αυτή την κατηγορία θα υπολογίσουν μόνο μια συνεκτική συνιστώσα του ψευδοφάσματος και για τον υπολογισμό των υπολοίπων πρέπει να εκτελεστούν εκ νέου, με αφετηρία κάποια άλλη ιδιοτιμή. Ένα άλλο πρόβλημα είναι ότι καθώς ακολουθούν την καμπύλη, αν γίνει κάποιος λάθος υπολογισμός ή σε σημεία που αυτή έχει περίεργη γεωμετρία (όπως απότομες αλλαγές κατεύθυνσης ή μικρή απόσταση μεταξύ δύο συνεκτικών συνιστωσών) μπορεί να δώσουν λάθος αποτελέσματα. Το πρόβλημα αυτό λύνεται προβλέποντας σημεία πολύ κοντά στα ήδη υπάρχοντα, γεγονός που όμως όπως είναι φανερό οδηγεί στην ανάγκη υπολογισμού περισσότερων σημείων και άρα στην αύξηση του χρόνου εκτέλεσης.

Πέρα από τις βασικές αλγοριθμικές ιδέες, μια πολύ σημαντική παράμετρος στο χρόνο υπολογισμού του ψευδοφάσματος αποτελεί η εισαγωγή παραλληλισμού στους αλγορίθμους, όπου είναι δυνατόν, δηλαδή η εκτέλεση των υπολογισμών με χρήση παράλληλων επεξεργαστών οι οποίοι επικοινωνούν μεταξύ τους, έτσι ώστε να μπορούν να γίνονται υπολογισμοί αρκετών σημείων ταυτόχρονα.

Θα μελετήσουμε λοιπόν θεωρητικά την έννοια του ψευδοφάσματος, των βάσεων του ορισμού του αλλά και των ιδιοτήτων του, όπως επίσης και αλγορίθμους κάθε κατηγορίας, θεωρητικά και πειραματικά με σκοπό την ανάλυση του τρόπου με τον οποίο λειτουργούν και το χρόνο εκτέλεσής τους και τελικά τη σύγκριση μεταξύ τους αλλά και μεταξύ των κατηγοριών.

2. Θεωρητικό Υπόβαθρο

2.1 Διαταραχές πινάκων και Ιδιοτιμές

Οι διαταραχές $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{E}$ όπου $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$ για κάποιο $\varepsilon > 0$ ενός τετραγωνικού πίνακα $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ καθώς και οι ιδιοτιμές τους αποτελούν τη βάση για τον ορισμό και τη μελέτη του ψευδοφάσματος ενός τετραγωνικού πίνακα και γι' αυτό στο παρόν κεφάλαιο θα μελετήσουμε το πρόβλημα διαταραχών ιδιοτιμών, τη σχέση δηλαδή των ιδιοτιμών των διαταραχών με αυτές του αρχικού πίνακα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.1. Έστω $\lambda \in \mathbb{C}$ μία ιδιοτιμή ενός τυχαίου πίνακα \mathbf{A} , αλγεβρικής πολλαπλότητας m . Τότε, για κάθε νόρμα πινάκων $\|\cdot\|$ και για κάθε $\delta > 0$, υπάρχει $\varepsilon > 0$ τέτοιο ώστε για κάθε πίνακα \mathbf{E} με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$, ο δίσκος $\Delta(\lambda, \delta)$ να περιέχει ακριβώς m ιδιοτιμές του πίνακα $\tilde{\mathbf{A}}$ (λαμβάνοντας υπ' όψιν και τις πολλαπλότητες).

Απόδειξη. Έστω $\delta > 0$ αρκετά μικρό ώστε η ιδιοτιμή λ να είναι η μοναδική ιδιοτιμή του \mathbf{A} εντός του δίσκου $\Delta(\lambda, \delta)$. Θεωρούμε διαταραχή $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{E}$, $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$ για κάποιο $\varepsilon > 0$ «αρκετά μικρό» και θέτουμε $\chi_{\mathbf{A}}(z)$ και $\chi_{\tilde{\mathbf{A}}}(z)$ τα χαρακτηριστικά πολυώνυμα των πινάκων \mathbf{A} και $\tilde{\mathbf{A}}$ αντίστοιχα και $\eta(z) = \chi_{\tilde{\mathbf{A}}}(z) - \chi_{\mathbf{A}}(z)$.

Υπενθύμιση: Ως χαρακτηριστικό πολυώνυμο ενός πίνακα \mathbf{A} ορίζουμε το $\chi_{\mathbf{A}}(z) = |\lambda \mathbf{I} - \mathbf{A}|$, όπου λ μία ιδιοτιμή του πίνακα.

Επειδή τα χαρακτηριστικά πολυώνυμα είναι συνεχή, αν $\tilde{\mathbf{A}} \rightarrow \mathbf{A}$ τότε $\eta(z) \rightarrow 0$ και αφού το $\chi_{\mathbf{A}}(z)$ δεν μηδενίζεται εξ' ορισμού πουθενά στο σύνορο $\partial\Delta(\lambda, \delta)$, θα υπάρχει $\varepsilon > 0$ τέτοιο ώστε για κάθε πίνακα \mathbf{E} με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$ να ισχύει ότι $|\eta(z)| \leq |\chi_{\mathbf{A}}(z)| \quad \forall z \in \partial\Delta$.

Υπενθύμιση: Σύμφωνα με το Θεώρημα του Rouché (Conway, 1978) από τη Μιγαδική Ανάλυση, αν για δύο αναλυτικές συναρτήσεις $\chi, \eta: \Omega \rightarrow \mathbb{C}$, αν είναι $|\eta(z)| \leq |\chi(z)| \quad \forall z \in \partial\Delta$, όπου $\Delta \subset \Omega$, τότε οι συναρτήσεις $\chi(z)$ και $\eta(z) + \chi(z)$ έχουν ακριβώς το ίδιο πλήθος ριζών εντός του Δ .

Επομένως, από το Θεώρημα του Rouché, τα πολυώνυμα $\chi_{\mathbf{A}}(z)$ και $\chi_{\tilde{\mathbf{A}}}(z) = \eta(z) + \chi_{\mathbf{A}}(z)$ έχουν τον ίδιο αριθμό ριζών εντός του Δ από όπου προκύπτει ότι στον δίσκο ακτίνας δ μιας ιδιοτιμής λ πολλαπλότητας m υπάρχουν ακριβώς m ιδιοτιμές της διαταραχής. \square

Έτσι, επιβεβαιώνεται η συνέχεια των διαταραγμένων ιδιοτιμών ως προς τα στοιχεία του \mathbf{E} .

Συνεπώς, παρατηρούμε ότι οι ιδιοτιμές των διαταραχών τείνουν να συγκεντρώνονται γύρω από τις ιδιοτιμές του αρχικού πίνακα. Η παρατήρηση αυτή είναι η βασική ιδέα για τον ορισμό που ψευδοφάσματος που θα δούμε παρακάτω και για την απόδειξή της χρειάζεται το επόμενο θεώρημα. Πριν το διατυπώσουμε υπενθυμίζουμε ότι με τον όρο *φάσμα* $\Lambda(\mathbf{A})$ ενός τετραγωνικού πίνακα \mathbf{A} , ορίζεται το σύνολο των ιδιοτιμών του.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.2. Έστω $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ με φάσμα $\Lambda(\mathbf{A})$ και $\|\cdot\|$ μια νόρμα πινάκων. Αν $\mathbf{Q} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ είναι ένας αντιστρέψιμος πίνακας, τότε για κάθε ιδιοτιμή $\tilde{\lambda}$ του διαταραγμένου πίνακα $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{E}$, $\tilde{\lambda} \in \Lambda(\tilde{\mathbf{A}}) \setminus \Lambda(\mathbf{A})$, θα ισχύει

$$\|\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{Q}\|^{-1} \leq \|\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{E}\mathbf{Q}\|$$

Απόδειξη. Είναι

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}^{-1}(\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{Q} &= \mathbf{Q}^{-1}((\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I}) + \mathbf{E})\mathbf{Q} \\ &= \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{Q} \left(\mathbf{I} + \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^{-1} \mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{E}\mathbf{Q} \right) \end{aligned}$$

Όμως, ο πίνακας $(\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})$ δεν είναι αντιστρέψιμος, από την παραπάνω εξίσωση προκύπτει ότι

$$\begin{aligned} 0 &= \det(\mathbf{Q}^{-1}(\tilde{\mathbf{A}} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{Q}) \\ &= \det\left(\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{Q} \left(\mathbf{I} + \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^{-1} \mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{E}\mathbf{Q} \right)\right) \\ &= \det(\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})\mathbf{Q}) \det\left(\mathbf{I} + \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^{-1} \mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{E}\mathbf{Q}\right) \end{aligned}$$

Και επειδή η πρώτη ορίζουσα είναι διάφορη του 0, συμπεραίνουμε ότι ο πίνακας $\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^{-1} \mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{E}\mathbf{Q}$ έχει ιδιοτιμή το -1. Τέλος, ως γνωστόν κάθε ιδιοτιμή του πίνακα είναι

μικρότερη ή ίση από τη νόρμα του κατ' απόλυτη τιμή και άρα $1 \leq \|\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^{-1} \mathbf{Q}\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{E}\mathbf{Q}\|$ (1),

οπότε τελικά και με χρήση της ανίσωσης Cauchy-Schwarz προκύπτει ότι

$1 \leq \|\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{A} - \tilde{\lambda}\mathbf{I})^{-1} \mathbf{Q}\| \|\mathbf{Q}^{-1}\mathbf{E}\mathbf{Q}\|$ από όπου καταλήγουμε στο ζητούμενο. \square (Bauer & Fike, 1960)

Στη συνέχεια, παρουσιάζεται η ειδική περίπτωση του Θεωρήματος 2.2 όπου ο πίνακας \mathbf{A} είναι διαγωνοποιήσιμος.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.3. Έστω $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ διαγωνοποιήσιμος με $\mathbf{A} = \mathbf{Q}^{-1} \mathbf{\Lambda} \mathbf{Q}$ και $\mathbf{\Lambda} = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$, όπου $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ οι ιδιοτιμές του. Θεωρούμε μια νόρμα $\|\cdot\|$ που ικανοποιεί τη σχέση $\|\text{diag}\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_n\}\| = \max_{1 \leq i \leq n} |\mu_i|$. Τέτοιες νόρμες είναι η νόρμα-1, η άπειρη νόρμα και η φασματική (νόρμα-2). Τότε για κάθε ιδιοτιμή $\tilde{\lambda}$ του $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{E}$, τότε υπάρχει ιδιοτιμή $\lambda_i \in \Lambda(\mathbf{A})$, $i = 1, \dots, n$ τέτοια ώστε

$$|\tilde{\lambda} - \lambda_i| \leq \|\mathbf{Q}\| \|\mathbf{Q}^{-1}\| \|\mathbf{E}\| = \kappa(\mathbf{Q}) \|\mathbf{E}\|,$$

όπου $\kappa(\mathbf{Q}) = \|\mathbf{Q}\| \|\mathbf{Q}^{-1}\|$ ο δείκτης κατάστασης του πίνακα \mathbf{Q} .

Απόδειξη. Από η σχέση (1) στην απόδειξη του Θεωρήματος 2.2 έχουμε ότι

$$\begin{aligned} 1 &\leq \left\| (\tilde{\lambda} \mathbf{I} - \mathbf{\Lambda})^{-1} \mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^{-1} \right\| \leq \|\mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^{-1}\| \left\| (\tilde{\lambda} \mathbf{I} - \mathbf{\Lambda})^{-1} \right\| \\ &= \|\mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^{-1}\| \max_{1 \leq i \leq n} \frac{1}{|\tilde{\lambda} - \lambda_i|} \\ &= \frac{\|\mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^{-1}\|}{\min_{1 \leq i \leq n} |\tilde{\lambda} - \lambda_i|}, \end{aligned}$$

και άρα

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\tilde{\lambda} - \lambda_i| \leq \|\mathbf{Q} \mathbf{E} \mathbf{Q}^{-1}\| \leq \|\mathbf{Q}\| \|\mathbf{Q}^{-1}\| \|\mathbf{E}\| = \kappa(\mathbf{Q}) \|\mathbf{E}\|. \square \text{ (Bauer \& Fike, 1960)}$$

Πόρισμα των Θεωρημάτων 2.2 και 2.3 αποτελεί και το γνωστό Θεώρημα του Gerschgorin.

ΠΟΡΙΣΜΑ 2.4. Έστω $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ένας κανονικός πίνακας ($\mathbf{A} \mathbf{A}^* = \mathbf{A}^* \mathbf{A}$). Αν $\tilde{\lambda}$ μία ιδιοτιμή του $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{E}$, τότε υπάρχει ιδιοτιμή $\lambda_i \in \Lambda(\mathbf{A})$, $i = 1, \dots, n$ τέτοια ώστε $|\tilde{\lambda} - \lambda_i| \leq \|\mathbf{E}\|_2$, όπου $\|\cdot\|_2 = \max\{\sqrt{\lambda}, \lambda \in \Lambda(\mathbf{A}^* \mathbf{A})\}$ η φασματική (νόρμα-2) νόρμα του \mathbf{A} .

Απόδειξη. Το πόρισμα αποδεικνύεται άμεσα από τα προηγούμενα, αρκεί να παρατηρήσουμε ότι κάθε κανονικός πίνακας είναι ορθομοναδιαία όμοιος με διαγώνιο και η νόρμα-2 των ορθομοναδιαίων πινάκων είναι ίση με τη μονάδα. Άρα, από το Θεώρημα 2.3 έχουμε ότι υπάρχει ιδιοτιμή λ_i τέτοια ώστε $|\tilde{\lambda} - \lambda_i| \leq \|\mathbf{Q}\| \|\mathbf{Q}^{-1}\| \|\mathbf{E}\|$, δηλαδή $|\tilde{\lambda} - \lambda_i| \leq \|\mathbf{E}\|$. \square

2.2 Παραγοντοποίηση Ιδιάζουσων Τιμών (SVD)

Η Παραγοντοποίηση Ιδιάζουσων Τιμών (*Singular Value Decomposition, SVD*) είναι μια από τις σημαντικότερες παραγοντοποιήσεις πινάκων, όσον αφορά τις εφαρμογές και χρησιμοποιείται ευρέως στους αλγορίθμους εύρεσης του ψευδοφάσματος. Επίσης είναι άμεσα συνδεδεμένη με τη νόρμα-2 πινάκων που επίσης είναι η πλέον διαδεδομένη νόρμα για τη μελέτη του. Για το λόγο αυτό, πριν περάσουμε στον ορισμό του ψευδοφάσματος παρουσιάζουμε σύντομα τον ορισμό της.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.5. (SVD) Αν $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times m}$, τότε υπάρχουν ορθομοναδιαίοι πίνακες $\mathbf{U} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ και $\mathbf{V} \in \mathbb{C}^{m \times m}$ τέτοιοι ώστε $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{S}\mathbf{V}^*$, όπου $\mathbf{S} = \text{diag}\{s_1, s_2, \dots, s_{\min\{n,m\}}\}$ και οι $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_{\min\{n,m\}} \geq 0$ καλούνται **ιδιάζουσες τιμές** του πίνακα. Επίσης οι στήλες των πινάκων \mathbf{U} και \mathbf{V} καλούνται **αριστερά** και **δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα** αντίστοιχα.

(Golub & Loan, 1996)

Από τον ορισμό της SVD προκύπτουν τα εξής συμπεράσματα για τις ιδιάζουσες τιμές, όπως τις ορίσαμε παραπάνω και τη δομή του πίνακα \mathbf{A} .

ΠΟΡΙΣΜΑ 2.6. Ισχύουν τα εξής:

1. $s_1 = \|\mathbf{A}\|_2$
2. Για $n \geq m$ είναι $\min_{\mathbf{x} \neq \mathbf{0}} \frac{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} = s_m$, ενώ αν $n = m$, δηλαδή αν ο \mathbf{A} είναι τετραγωνικός ισχύει ότι $|\det(\mathbf{A})| = s_1 s_2 \dots s_n$.
3. Οι μη μηδενικές ιδιάζουσες τιμές του \mathbf{A} είναι οι τετραγωνικές ρίζες των μη μηδενικών ιδιοτιμών των πινάκων $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$ και $\mathbf{A}^*\mathbf{A}$.
4. Τα αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα (οι στήλες του \mathbf{U}) είναι τα ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{A}\mathbf{A}^*$.
5. Τα δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα (οι στήλες του \mathbf{V}) είναι τα ιδιοδιανύσματα του $\mathbf{A}^*\mathbf{A}$.

2.3 Ψευδοφάσμα πίνακα

Όπως αναφέραμε στην Παράγραφο 2.1 οι διαταραχές ενός πίνακα και κατ' επέκταση των ιδιοτιμών του αποτελούν τη βάση για τον ορισμό του ψευδοφάσματος. Πράγματι, ως *ψευδοφάσμα*, $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$, ενός πίνακα $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ορίζεται το σύνολο των ιδιοτιμών των διαταραχών του \mathbf{A} , δηλαδή των πινάκων $\tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A} + \mathbf{E}$, $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$. Συνεπώς, παρατηρούμε ότι το ψευδοφάσμα αποτελεί επέκταση του φάσματος, ώστε να καλύψει όλο το \mathbb{C} , καθώς $\varepsilon \rightarrow \infty$. Πιο συγκεκριμένα, ο ορισμός του ψευδοφάσματος είναι:

ΟΡΙΣΜΟΣ 2.7. Έστω $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ και $\|\cdot\|$ μια νόρμα πίνακα. Τότε για κάθε $\varepsilon \geq 0$, οι ακόλουθοι ορισμοί του ψευδοφάσματος $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ είναι ισοδύναμοι:

1. $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{z \in \mathbb{C} : \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \varepsilon^{-1}\}$.
2. $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{z \in \mathbb{C} : \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{v}\| \leq \varepsilon, \text{ όπου } \mathbf{v} \in \mathbb{C}^n \text{ με } \|\mathbf{v}\| = 1\}$.
3. $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{z \in \mathbb{C} : z \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E}), \text{ για κάποιο } \mathbf{E} \text{ με } \|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon\}$.
4. $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \{z \in \mathbb{C} : s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) \leq \varepsilon\}$, όπου $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ η μικρότερη ιδιάζουσα τιμή του πίνακα $z\mathbf{I} - \mathbf{A}$ με βάση τη νόρμα-2.

(Trefethen & Embree, 2005)

Απόδειξη ισοδυναμίας ορισμών.

(1) \Rightarrow (2)

Υποθέτουμε από (1) ότι $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \varepsilon^{-1}$. Τότε υπάρχει μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^n$ τέτοιο ώστε

$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{u}\|$. Ορίζουμε $\mathbf{w} = (z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{u}$ και άρα

$$\frac{1}{\varepsilon} \leq \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \frac{\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\mathbf{u}\|}{\|\mathbf{u}\|} = \frac{\|\mathbf{w}\|}{\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{w}\|}.$$

Συνεπώς, το μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{v} = \mathbf{w}/\|\mathbf{w}\|$ θα ικανοποιεί τη σχέση $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{v}\| \leq \varepsilon$.

(2) \Rightarrow (3)

Υποθέτουμε από (2) ότι υπάρχει ένα μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ τέτοιο ώστε $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{v}\| \leq \varepsilon$.

Τότε, θα υπάρχει ακόμα ένα μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{u} \in \mathbb{C}^n$ τέτοιο ώστε $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{v} = \varepsilon'\mathbf{u}$, για κάποιο ε' με $0 \leq \varepsilon' \leq \varepsilon$.

Από το Θεώρημα Αναπαράστασης του Riesz και το Θεώρημα Hahn-Banach, υπάρχει μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{w} \in \mathbb{C}^n$ τέτοιο ώστε $\mathbf{w}^* \mathbf{v} = 1$. Συνεπώς από τα παραπάνω,

$$\begin{aligned} (z\mathbf{I} - \mathbf{A})\mathbf{v} &= \varepsilon'\mathbf{u} \Leftrightarrow \\ z\mathbf{v} &= \mathbf{A}\mathbf{v} + \varepsilon'\mathbf{u} = \mathbf{A}\mathbf{v} + \varepsilon'\mathbf{u}\mathbf{w}^* \mathbf{v} \Leftrightarrow \\ z\mathbf{v} &= (\mathbf{A} + \varepsilon'\mathbf{u}\mathbf{w}^*)\mathbf{v} \end{aligned}$$

και άρα $z \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E})$, όπου $\mathbf{E} = \varepsilon'\mathbf{u}\mathbf{w}^*$ με $\|\mathbf{E}\| = \|\varepsilon'\mathbf{u}\mathbf{w}^*\| \leq \varepsilon' \leq \varepsilon$.

$$(3) \Rightarrow (1)$$

Υποθέτουμε από (3) ότι $z \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E})$ για κάποιον πίνακα \mathbf{E} με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$. Τότε θα υπάρχει μοναδιαίο διάνυσμα $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ για το οποίο ισχύει $(\mathbf{A} + \mathbf{E})\mathbf{v} = z\mathbf{v}$.

Ισχυριζόμαστε ότι $\mathbf{v} = (z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \mathbf{E}\mathbf{v}$. Πράγματι,

$$\mathbf{v} = \mathbf{E}\mathbf{v} \Leftrightarrow \mathbf{v}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \mathbf{E}\mathbf{v} \Leftrightarrow z\mathbf{v} = (\mathbf{A} + \mathbf{E})\mathbf{v}.$$

Οπότε έχουμε

$$1 = \|\mathbf{v}\| = \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \mathbf{E}\mathbf{v}\| \leq \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \|\mathbf{E}\mathbf{v}\| \leq \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \varepsilon$$

δηλαδή $\varepsilon^{-1} \leq \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\|$.

$$(1) \Leftrightarrow (4)$$

Υποθέτουμε ότι η $\|\circ\|$ είναι η νόρμα-2. Έχουμε ότι αν

$$s_1(\mathbf{A}) = s_{\max}(\mathbf{A}) \geq s_2(\mathbf{A}) \geq \dots \geq s_n(\mathbf{A}) = s_{\min}(\mathbf{A})$$

είναι οι θετικές ιδιάζουσες τιμές του \mathbf{A} , τότε οι ιδιάζουσες τιμές του \mathbf{A}^{-1} θα είναι οι

$$\frac{1}{s_1(\mathbf{A})} \leq \frac{1}{s_2(\mathbf{A})} \leq \dots \leq \frac{1}{s_n(\mathbf{A})}.$$

Επίσης γνωρίζουμε ότι $\|\mathbf{A}\|_2 = s_1(\mathbf{A})$ και $\|\mathbf{A}^{-1}\|_2 = 1/s_n(\mathbf{A})$, δηλαδή ισχύει ότι

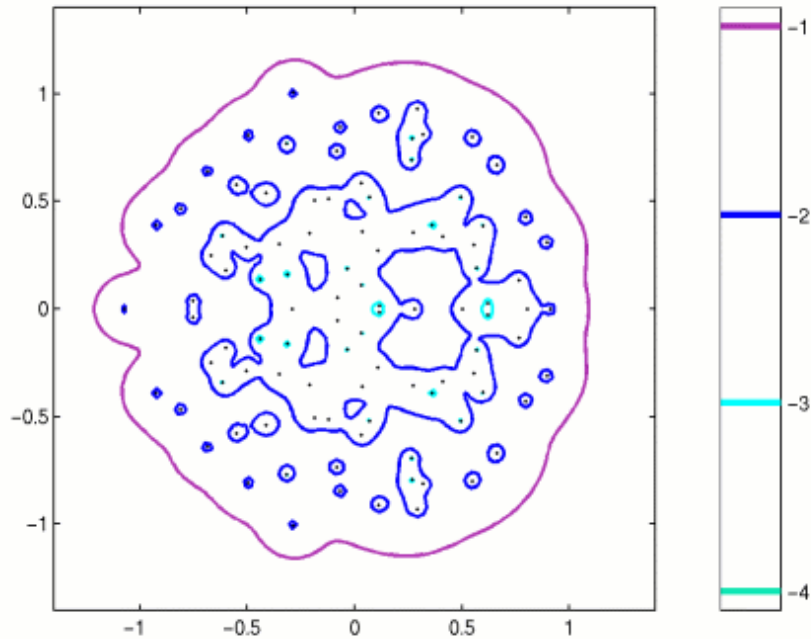
$$\|\mathbf{A}^{-1}\|_2 = s_{\max}(\mathbf{A}^{-1}) = \frac{1}{s_{\min}(\mathbf{A})}.$$

Συνεπώς έχουμε ότι

$$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \frac{1}{\varepsilon} \Leftrightarrow s_{\max}((z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}) = \frac{1}{s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})} \geq \frac{1}{\varepsilon} \Leftrightarrow s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) \leq \varepsilon,$$

με βάση πάντα τη νόρμα-2. \square

Από τον Ορισμό 2.7 είναι φανερό ότι το φάσμα αποτελεί ειδική περίπτωση ψευδοφάσματος, για $\varepsilon=0$.



Εικόνα 1. Το ψευδοφάσμα, για διάφορες τιμές του ε , ενός πίνακα με διάσταση $n=200$ με στοιχεία από το $N(0,1/200)$. (Embree & Trefethen, n.d.)

Συχνά, στις πρακτικές εφαρμογές η έννοια του ψευδοφάσματος είναι πολύ πιο χρήσιμη από αυτή του φάσματος, διότι εμπεριέχει τις ιδιοτιμές αλλά και τη συμπεριφορά τους για μικρές διαταραχές του πίνακα. Εκτός αυτού, η συμπεριφορά του πίνακα κοντά στις ιδιοτιμές είναι πολλές φορές απρόβλεπτη ακόμα και για σχετικά απλούς πίνακες.

Για τους παραπάνω λόγους έχουν αναπτυχθεί αρκετοί αλγόριθμοι για τον υπολογισμό κυρίως του συνόρου του ψευδοφάσματος, το οποίο όπως φαίνεται και στον Ορισμό 2.7 (4) είναι το σύνολο

$$\partial\Lambda_\varepsilon \subseteq \left\{ z \in \mathbb{C} : \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \varepsilon^{-1} \right\} \equiv \left\{ z \in \mathbb{C} : s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \varepsilon \right\} \quad (*)$$

όπου το σύνολο $\left\{ z \in \mathbb{C} : \|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| = \varepsilon^{-1} \right\} \setminus \partial\Lambda_\varepsilon$ αποτελείται από το πολύ n σημεία και άρα θεωρούμε, χωρίς βλάβη της γενικότητας ότι τα σύνολα της σχέσης (*) ταυτίζονται μεταξύ τους.

Η παραπάνω σχέση θα μας απασχολήσει κατ' εξοχήν στα επόμενα κεφάλαια, καθώς οι αλγόριθμοι που θα παρουσιάσουμε έχουν ως στόχο την εύρεση του συνόρου του ψευδοφάσματος με βάση αυτή και την απεικόνισή του στο μιγαδικό επίπεδο. Για το σκοπό αυτό, στη συνέχεια παρουσιάζονται ορισμένα σχετικά θεωρήματα μέσα από τα οποία προκύπτουν συμπεράσματα για τη γραφική μορφή του ψευδοφάσματος, καθώς και οι ειδικές τους περιπτώσεις, που αφορούν το φάσμα του πίνακα.

Σημειώνεται ότι στα παρακάτω θεωρείται ότι $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ και η $\|\cdot\|$ νόρμα είναι η διανυσματική νόρμα-2, $\|\mathbf{x}\|_2 = \left(\sum_{i=1}^n |x_i|^2 \right)^{1/2}$ καθώς και η επαγόμενη από αυτήν νόρμα-2 πίνακα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.8. *Κάθε συνεκτικό τμήμα του ψευδοφάσματος περιέχει τουλάχιστον μία ιδιοτιμή του \mathbf{A} .*

Απόδειξη. Από τον Ορισμό 2.7 (3), για κάθε \mathbf{E} με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$, ισχύει ότι $\Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E}) \subset \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. Συνεπώς, αν G είναι ένα συνεκτικό τμήμα του $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ και $z \in G$ τότε υπάρχει πίνακας \mathbf{E} με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$ και $z \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E})$.

Επιπλέον, παρατηρούμε ότι για κάθε $t \in [0, 1]$ ισχύει επίσης ότι $\Lambda(\mathbf{A} + t\mathbf{E}) \subset \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. Έτσι, λόγω συνέχειας των ιδιοτιμών του $\mathbf{A} + t\mathbf{E}$ ως προς τα στοιχεία του $t\mathbf{E}$ (Θεώρημα 2.1) άρα και ως προς t , για τις διάφορες τιμές του t οι ιδιοτιμές του \mathbf{A} και του $\mathbf{A} + t\mathbf{E}$ συνδέονται με συνεχείς καμπύλες εντός του $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. Άρα, αφού $z \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E})$, θα υπάρχει $\lambda_0 \in \Lambda(\mathbf{A})$ η οποία συνδέεται με το z με συνεχή καμπύλη εντός του $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ και άρα έχουμε το ζητούμενο. \square (Trefethen & Embree, 2005)

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.9. *Ισχύει ότι $\|\mathbf{A}^{-1}\| \geq \varepsilon^{-1}$ αν και μόνο $0 \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$.*

Για $\varepsilon = 0$: Ο \mathbf{A} είναι μη αντιστρέψιμος αν και μόνο αν $0 \in \Lambda(\mathbf{A})$.

Απόδειξη. Άμεση συνέπεια του ορισμού (1), για $\lambda = 0$. \square (Embree & Trefethen, 2000)

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.10. *Αν το ψευδοφάσμα $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ του \mathbf{A} έχει n συνεκτικές συνιστώσες τότε κάθε πίνακας $\mathbf{A} + \mathbf{E}$, $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$ θα είναι διαγωνοποιήσιμος και άρα και ο \mathbf{A} θα είναι διαγωνοποιήσιμος.*

Για $\varepsilon = 0$: Ο \mathbf{A} είναι διαγωνοποιήσιμος αν έχει n διακριτές ιδιοτιμές.

Απόδειξη. Αν το $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ έχει n συνεκτικές συνιστώσες, τότε από την απόδειξη του Θεωρήματος 2.8., κάθε τμήμα θα περιέχει μια ιδιοτιμή του $\mathbf{A} + \mathbf{E}$ και άρα αυτός θα είναι διαγωνοποιήσιμος. \square (Trefethen & Embree, 2005)

Ακολουθούν δύο θεωρήματα που αναφέρονται στο μέγεθος του ψευδοφάσματος, αρχικά γενικά για οποιονδήποτε πίνακα και στη συνέχεια ειδικεύουμε για διαγώνιους και διαγωνοποιήσιμους πίνακες.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.11. Έστω ο $\mathbf{A} = [\alpha_{ij}]$. Θεωρούμε, για κάθε $i = 1, \dots, n$ το άθροισμα των μη διαγώνιων στοιχείων $r_i = \sum_{j \neq i} |a_{ij}|$. Τότε ισχύει ότι

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subseteq \bigcup_i D(\alpha_{ii}, r_i + \varepsilon\sqrt{n}).$$

Για $\varepsilon = 0$: $\Lambda(\mathbf{A}) \subseteq \bigcup_i D(\alpha_{ii}, r_i)$.

Απόδειξη. Από το Θεώρημα του Gerschgorin (Gerschgorin, 1931) για τον πίνακα $\mathbf{A} + \mathbf{E}$, κάθε ιδιοτιμή του πίνακα περιέχεται σε κάποιο δίσκο με κέντρο $a_{ii} + e_{ii}$ και ακτίνα $\sum_{j \neq i} |a_{ij} + e_{ij}| \leq r_i + \sum_{j \neq i} |e_{ij}|$. Κάθε τέτοιος δίσκος περιέχεται στον δίσκο με κέντρο a_{ii} και ακτίνα $r_i + \sum_{j=1}^n |e_{ij}| = r_i + \|\mathbf{E}_i\|_\infty$, όπου \mathbf{E}_i πίνακας ίσος με τον \mathbf{E} κατά την i -γραμμή και 0 αλλού. Τέλος, ως γνωστόν ισχύει ότι $\|\mathbf{E}_i\|_\infty \leq \sqrt{n} \|\mathbf{E}_i\|_2 \leq \sqrt{n} \|\mathbf{E}\|_2$, οπότε αποδείχθηκε το θεώρημα. \square

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.12. Έστω $\mathbf{B} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Τότε ισχύει $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \subseteq \Lambda_{\varepsilon + \|\mathbf{B}\|}(\mathbf{A})$.

Για $\varepsilon = 0$: $\Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E}) \subseteq \Lambda_{\|\mathbf{E}\|}(\mathbf{A})$.

Απόδειξη. Έστω $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A} + \mathbf{B})$. Τότε, υπάρχει πίνακας \mathbf{E} , με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$ τέτοιος ώστε $\|\mathbf{A} + \mathbf{B} + \mathbf{E}\| \mathbf{v} = z\mathbf{v}$ για κάποιο μη μηδενικό διάνυσμα \mathbf{v} . Επίσης, από τριγωνική ανισότητα έχουμε ότι $\|\mathbf{B} + \mathbf{E}\| \leq \varepsilon + \|\mathbf{B}\|$, οπότε $z \in \Lambda_{\varepsilon + \|\mathbf{B}\|}(\mathbf{A})$. \square

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.13. Έστω $z \in \mathbb{C} \setminus \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. Τότε $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \frac{1}{d(z, \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})) + \varepsilon}$

Για $\varepsilon = 0$: $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \frac{1}{d(z, \Lambda(\mathbf{A}))}$

Απόδειξη. Υπάρχει μια διαταραχή του \mathbf{A} της τάξης του $\|\mathbf{E}\| = d(z, \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})) + \varepsilon$ η οποία καθιστά το z ιδιοτιμή και άρα η συνθήκη ικανοποιείται εξ ορισμού. \square (Embree & Trefethen, 2000)

ΠΟΡΙΣΜΑ 2.14. Έστω $z \in \mathbb{C}$. Αν $d(z, \Lambda(\mathbf{A})) \leq \varepsilon$ τότε $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$.

Απόδειξη. Προκύπτει άμεσα από το προηγούμενο θεώρημα και τον ορισμό (1) του ψευδοφάσματος. \square

Το επόμενο θεώρημα εξετάζει το μέγεθος του ψευδοφάσματος ενός διαγώνιου πίνακα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.15. *Ψευδοφάσμα διαγώνιου πίνακα. Έστω $\mathbf{B} = \text{diag}\{b_1, b_2, \dots, b_n\}$ διαγώνιος πίνακας.*

Τότε ισχύει ότι

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{B}) = \Lambda(\mathbf{B}) + D(0, \varepsilon) = \bigcup_{i=1}^n D(b_i, \varepsilon).$$

Απόδειξη. Από τον ορισμό (1) του ψευδοφάσματος για κάθε $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{B})$ ισχύει ότι

$$\begin{aligned} \frac{1}{\|(\mathbf{B} - z\mathbf{I})^{-1}\|} &\leq \varepsilon \Leftrightarrow \\ \frac{1}{\|\text{diag}\{b_1 - z, b_2 - z, \dots, b_n - z\}^{-1}\|} &\leq \varepsilon \Leftrightarrow \\ \frac{1}{\max_{1 \leq i \leq n} |b_i - z|^{-1}} &\leq \varepsilon \Leftrightarrow \\ \min_{1 \leq i \leq n} |b_i - z| &\leq \varepsilon \end{aligned}$$

από όπου προκύπτει το ζητούμενο. \square (Trefethen & Embree, 2005)

Συνεχίζοντας, τα επόμενα θεωρήματα αφορούν τη συμπεριφορά του ψευδοφάσματος κάτω από μετασχηματισμούς πινάκων. Ξεκινάμε με τους μετασχηματισμούς ομοιότητας.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.16. *Έστω \mathbf{S} αντιστρέψιμος και έστω $\mathbf{B} = \text{diag}\{b_1, b_2, \dots, b_n\}$ διαγώνιος πίνακας, τέτοιοι ώστε $\mathbf{A} = \mathbf{SBS}^{-1}$ μια διαγωνοποίηση του \mathbf{A} . Τότε θα ισχύει $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subseteq \Lambda_{\kappa(\mathbf{S})\varepsilon}(\mathbf{B})$, όπου $\kappa(\mathbf{S}) = \|\mathbf{S}\| \|\mathbf{S}^{-1}\|$ ο δείκτης κατάστασης του \mathbf{S} .*

Για $\varepsilon = 0$: Με τις παραπάνω προϋποθέσεις, ισχύει ότι $\Lambda(\mathbf{A}) = \Lambda(\mathbf{B})$.

Απόδειξη. Αφού $\mathbf{A} = \mathbf{SBS}^{-1}$ τότε θα είναι $(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = \mathbf{S}(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\mathbf{S}^{-1}$ και άρα, από ανισότητα

Cauchy-Schwarz έχουμε $\|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \leq \|\mathbf{S}\| \|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\| \|\mathbf{S}^{-1}\| = \kappa(\mathbf{S}) \|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\|$. Συνεπώς αφού

$\|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \geq \varepsilon^{-1}$, τότε $\|(\lambda\mathbf{I} - \mathbf{B})^{-1}\| \geq (\kappa(\mathbf{S})\varepsilon)^{-1}$, δηλαδή $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subseteq \Lambda_{\kappa(\mathbf{S})\varepsilon}(\mathbf{B})$. \square (Embree &

Trefethen, 2000)

Από το παραπάνω θεώρημα γίνεται αντιληπτό ότι ο ψευδοφάσμα ενός πίνακα μεταβάλλεται κατά κανόνα αν εφαρμοστεί σ' αυτόν κάποιος μετασχηματισμός ομοιότητας. Ένα πολύ σημαντικό πόρισμα που προκύπτει είναι ότι εξαίρεση στον παραπάνω κανόνα είναι οι ορθομοναδιαίοι μετασχηματισμοί.

ΠΟΡΙΣΜΑ 2.17 Το ψευδοφάσμα $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ παραμένει αναλλοίωτο κάτω από ορθομοναδιαίους μετασχηματισμούς ομοιότητας.

Απόδειξη. Ως γνωστόν, αν ο πίνακας \mathbf{S} είναι ορθομοναδιαίος θα ισχύει $\kappa(\mathbf{S})=1$. Το αποτέλεσμα είναι λοιπόν προφανές από το Θεώρημα 2.16. \square

Με βάση τα Θεωρήματα 2.15. και 2.16., μπορούμε να διατυπώσουμε πιο συγκεκριμένα τη μορφή του ψευδοφάσματος κάτω από διαγωνοποίηση πίνακα, σε σχέση με το ψευδοφάσμα του διαγώνιου πίνακα που εμπλέκεται στο μετασχηματισμό.

ΠΟΡΙΣΜΑ 2.18. Ψευδοφάσμα διαγωνοποιήσιμου πίνακα. Έστω \mathbf{S} αντιστρέψιμος και έστω $\mathbf{B} = \text{diag}\{b_1, b_2, \dots, b_n\}$ διαγώνιος πίνακας, τέτοιοι ώστε $\mathbf{A} = \mathbf{SBS}^{-1}$ μια διαγωνοποίηση του \mathbf{A} . Τότε

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subseteq \Lambda(\mathbf{A}) + D(0, \varepsilon\kappa(\mathbf{S})) = \bigcup_{\lambda_i \in \Lambda(\mathbf{A})} D(\lambda_i, \varepsilon\kappa(\mathbf{S})).$$

Απόδειξη. Από το Θεώρημα 2.16. έχουμε ότι $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subseteq \Lambda_{\kappa(\mathbf{S})\varepsilon}(\mathbf{B})$ (1).

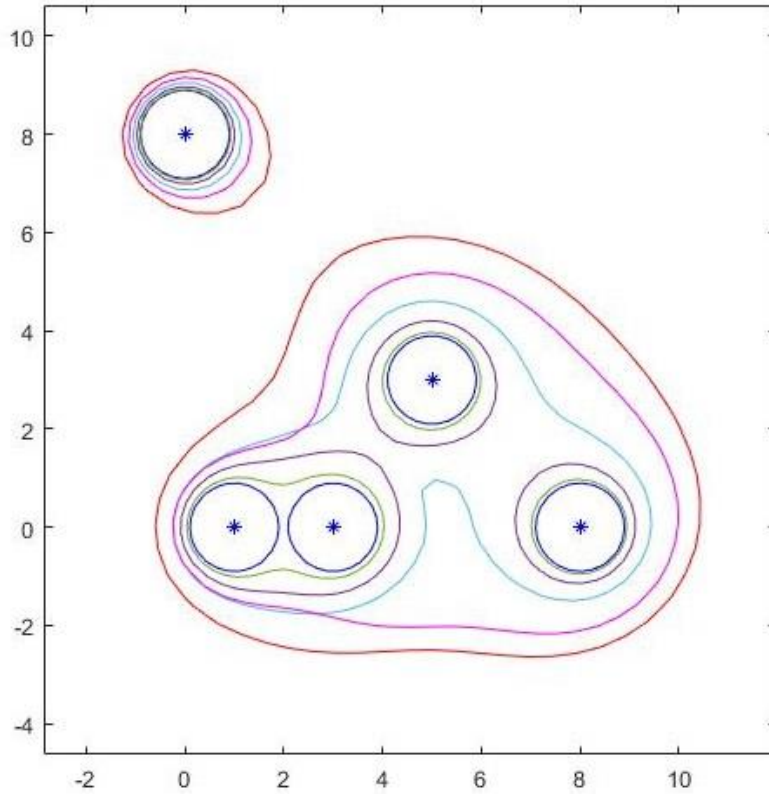
Επιπλέον, αφού ο \mathbf{B} είναι διαγώνιος, από το Θεώρημα 2.15. ξέρουμε ότι $\Lambda_\delta(\mathbf{B}) = \Lambda(\mathbf{B}) + D(0, \delta) \quad \forall \delta > 0$ και άρα και για $\delta = \varepsilon\kappa(\mathbf{S})$.

Ισχύει επίσης ότι $\Lambda(\mathbf{A}) = \Lambda(\mathbf{B})$ και άρα η παραπάνω σχέση γράφεται ως

$$\Lambda_{\varepsilon\kappa(\mathbf{S})}(\mathbf{B}) = \Lambda(\mathbf{A}) + D(0, \varepsilon\kappa(\mathbf{S})) = \bigcup_{\lambda_i \in \Lambda(\mathbf{A})} D(\lambda_i, \varepsilon\kappa(\mathbf{S})) \quad (2).$$

Από τις σχέσεις (1) και (2) έχουμε το ζητούμενο. \square (Trefethen & Embree, 2005)

Από τα παραπάνω θεωρήματα προκύπτει ότι το ψευδοφάσμα ενός κανονικού πίνακα (ενός πίνακα για τον οποίο ισχύει $\mathbf{AA}^* = \mathbf{A}^*\mathbf{A}$, όπως οι διαγώνιοι πίνακες), είναι, όπως αναφέρει το Θεώρημα 2.15 η ένωση των κυκλικών δίσκων του μιγαδικού επιπέδου με κέντρα τις ιδιοτιμές του πίνακα και ακτίνα ε . Συνεπώς στη γενική περίπτωση, το Λ_ε επηρεάζεται από το πόσο «κοντά» σε κανονικό πίνακα είναι ο \mathbf{A} . Η παραπάνω διαπίστωση απεικονίζεται στην εικόνα που ακολουθεί.



Εικόνα 2: Η απόκλιση του ψευδοφάσματος από τέλειους κύκλους με κέντρα τις ιδιοτιμές ενός κανονικού πίνακα, όσο ο πίνακας αποκλίνει από την κανονικότητα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.19. Έστω \mathbf{V} είναι ένας $n \times k$, με $k \leq n$, πίνακας με ορθοκανονικές στήλες και \mathbf{H} είναι ένας $k \times k$ τετραγωνικός πίνακας. Αν $\mathbf{AV} = \mathbf{VH}$ τότε $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{H}) \subseteq \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$.

Απόδειξη. Έστω $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{H})$. Τότε από τον ορισμό (2) του ψευδοφάσματος $\|(z\mathbf{I} - \mathbf{H})\mathbf{u}\| \leq \varepsilon$ για κάποιο μοναδιαίο διάνυσμα \mathbf{u} και άρα $\|z\mathbf{u} - \mathbf{H}\mathbf{u}\| \leq \varepsilon$ οπότε και $\|\mathbf{V}z\mathbf{u} - \mathbf{VH}\mathbf{u}\| \leq \varepsilon$ άρα από υπόθεση $\|\mathbf{V}z\mathbf{u} - \mathbf{AV}\mathbf{u}\| \leq \varepsilon$ και όμοια με πριν $\|z\mathbf{u} - \mathbf{A}\mathbf{u}\| \leq \varepsilon$ άρα τελικά $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. \square (Embree & Trefethen, 2000)

Τελευταία εξετάζουμε την περίπτωση των γραμμικών μετασχηματισμών.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.20. Για κάθε $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ισχύει ότι $\Lambda_{\varepsilon|\beta|}(\alpha\mathbf{I} + \beta\mathbf{A}) = \alpha + \beta\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$.

Για $\varepsilon = 0$: Για κάθε $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$ ισχύει ότι $\Lambda(\alpha + \beta\mathbf{A}) = \alpha + \beta\Lambda(\mathbf{A})$.

Απόδειξη. Για $\beta = 0$ το αποτέλεσμα είναι προφανές. Υποθέτουμε λοιπόν ότι $\beta \neq 0$. Τότε από τον ορισμό (1) του ψευδοφάσματος έχουμε ότι $z \in \Lambda_{\varepsilon|\beta|}(\alpha\mathbf{I} + \beta\mathbf{A})$ αν και μόνο αν

$$\frac{1}{\varepsilon|\beta|} \leq \left\| \left(z\mathbf{I} - (\alpha\mathbf{I} + \beta\mathbf{A}) \right)^{-1} \right\| = \frac{1}{|\beta|} \left\| \left(\frac{z-\alpha}{\beta} \mathbf{I} - \mathbf{A} \right)^{-1} \right\| \Leftrightarrow$$

$$\frac{1}{\varepsilon} \leq \left\| \left(\frac{z-\alpha}{\beta} \mathbf{I} - \mathbf{A} \right)^{-1} \right\|$$

δηλαδή αν και μόνο αν $\frac{z-\alpha}{\beta} \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \Leftrightarrow z \in \alpha + \beta\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. \square (Trefethen & Embree, 2005)

Τελειώνοντας την παράγραφο, τα παρακάτω θεωρήματα συνδέουν το ψευδοφάσμα με τη συμπεριφορά της νόρμας του πίνακα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.21. Αν $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ τότε $\|\mathbf{A}\| \geq |z| - \varepsilon$.

Για $\varepsilon = 0$: Αν $\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})$ τότε $\|\mathbf{A}\| \geq |\lambda|$.

Απόδειξη. Έστω $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. Τότε $\mathbf{A}\mathbf{v} = z\mathbf{v} + \varepsilon\mathbf{u}$ για κάποια μοναδιαία διανύσματα \mathbf{u}, \mathbf{v} . Οπότε από τριγωνική ανισότητα και ανισότητα Cauchy-Schwarz $\|\mathbf{A}\| \geq |z| - \varepsilon$. \square

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.22. Εάν υπάρχει $c \geq 0$ τέτοιο ώστε $\max_{z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})} |z| > 1 + c\varepsilon$, τότε $\sup_{k \geq 0} \|\mathbf{A}^k\| > c$.

Για $\varepsilon = 0$: Αν $\max_{\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})} |\lambda| > 1$ τότε $\sup_{k \geq 0} \|\mathbf{A}^k\| = \infty$.

Απόδειξη. Θεωρούμε $c \geq 1$, καθώς το αποτέλεσμα είναι τετριμμένο για $c < 1$, αφού $\sup_{k \geq 0} \|\mathbf{A}^k\| \geq \|\mathbf{A}^0\| = 1 > c$.

Αν $\max_{\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})} |\lambda| > 1$, τότε το θεώρημα ισχύει, αφού ως γνωστόν $\max_{\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})} |\lambda^k| \leq \|\mathbf{A}^k\|$ και $\max_{\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})} |\lambda^k| \rightarrow \infty$,

οπότε θεωρούμε επίσης ότι $\max_{\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})} |\lambda| \leq 1$. Με αυτές τις υποθέσεις, μπορούμε να γράψουμε την

ποσότητα $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ ως $(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = z^{-1}(\mathbf{I} - z^{-1}\mathbf{A} + z^{-2}\mathbf{A}^2 + \dots)$,

που ισχύει για κάθε z με $|z| > 1$. Αν δεχθούμε ότι $\|\mathbf{A}^k\| \leq c$, για όλα τα $k \geq 0$, τότε από τριγωνική ανισότητα

$$\frac{1}{\varepsilon} \leq \left\| (z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \right\| \leq \frac{|z^{-1}|c}{1 - |z^{-1}|} = \frac{c}{|z| - 1}, \quad \forall z \text{ με } |z| > 1.$$

Επομένως το ψευδοφάσμα του \mathbf{A} περιέχεται στον δίσκο με κέντρο την αρχή των αξόνων και ακτίνα $1 + c\varepsilon$, δηλαδή $\max_{z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})} |z| \leq 1 + c\varepsilon$. \square

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.23. Αν $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ τότε $\|\mathbf{A}^k\| \geq |z|^k - \frac{k\varepsilon\|\mathbf{A}\|^{k-1}}{1-k\varepsilon/\|\mathbf{A}\|}$, για κάθε k τέτοιο ώστε $k\varepsilon < \|\mathbf{A}\|$.

Για $\varepsilon=0$: Αν $\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})$ τότε $\|\mathbf{A}^k\| \geq |\lambda|^k$ για όλα τα k .

Απόδειξη. Έστω \mathbf{E} με $\|\mathbf{E}\| \leq \varepsilon$, και $z \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E})$. Τότε $\|(\mathbf{A} + \mathbf{E})^k\| \geq |z|^k$ και άρα

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}^k\| &\geq |z|^k - k\varepsilon\|\mathbf{A}\|^{k-1} - \binom{k}{2}\varepsilon^2\|\mathbf{A}\|^{k-2} - \dots \\ &\geq |z|^k - k\varepsilon\|\mathbf{A}\|^{k-1} - \left(1 + k\varepsilon/\|\mathbf{A}\| + (k\varepsilon)^2/\|\mathbf{A}\|^2 + \dots\right). \end{aligned}$$

Συνεπώς, η παραπάνω σειρά συγκλίνει στο 0 για $k\varepsilon < \|\mathbf{A}\|$, οπότε

$$\|\mathbf{A}^k\| \geq |z|^k - \frac{k\varepsilon\|\mathbf{A}\|^{k-1}}{1-k\varepsilon/\|\mathbf{A}\|}. \quad \square$$

ΘΕΩΡΗΜΑ 2.24. Εάν υπάρχει $c \geq 0$ τέτοιο ώστε $\max_{z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})} \operatorname{Re}(z) > c\varepsilon$, τότε $\sup_{t>0} \|e^{t\mathbf{A}}\| > c$.

Για $\varepsilon=0$: Αν υπάρχει $\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})$ τέτοιο ώστε $\max_{\lambda \in \Lambda(\mathbf{A})} \operatorname{Re}(\lambda) > 0$ τότε ισχύει ότι $\sup_{t>0} \|e^{t\mathbf{A}}\| = \infty$.

Απόδειξη. Όμοια με το Θεώρημα 2.22., θεωρούμε ότι $c \geq 1$ και $\max_{z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})} \operatorname{Re}(z) \leq 0$.

Χρησιμοποιώντας την ταυτότητα του μετασχηματισμού Laplace

$$(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = \int_0^\infty e^{-zt} e^{t\mathbf{A}} dt,$$

που ισχύει για κάθε z με $\operatorname{Re} z > 0$, θα αποδείξουμε ότι αν $\sup_{t>0} \|e^{t\mathbf{A}}\| \leq c$ τότε θα πρέπει

$\max_{z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})} \operatorname{Re}(z) \leq c\varepsilon$. Πράγματι, αν $\sup_{t>0} \|e^{t\mathbf{A}}\| \leq c$ τότε από την ταυτότητα έχουμε ότι

$\|(z\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\| \leq \frac{c}{\operatorname{Re} z}$, για κάθε z με $\operatorname{Re} z > 0$, που σημαίνει ότι το ψευδοφάσμα βρίσκεται στο

ημιεπίπεδο που ορίζεται από την ευθεία $\operatorname{Re} z \leq c\varepsilon$, δηλαδή $\max_{z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})} \operatorname{Re}(z) \leq c\varepsilon$, άτοπο. \square

(Embree & Trefethen, 2000)

3. Ο αλγόριθμος GRID

Ξεκινάμε τη μελέτη των αλγορίθμων με το απλούστερο αυτών, τον αλγόριθμο GRID. Για την εύρεση του ψευδοφάσματος ενός πίνακα $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$, ο αλγόριθμος GRID βασίζεται στην επιλογή ενός χωρίου του μιγαδικού επιπέδου, και στην κατασκευή ενός πλέγματος Ω (grid) μέσα στο χωρίο αυτό, αποτελούμενου από σημεία z του μιγαδικού επιπέδου και του υπολογισμού της $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ για κάθε $z \in \Omega$. Στη συνέχεια, αποφαινεται εάν το συγκεκριμένο z ανήκει στο ψευδοφάσμα με βάση τον Ορισμό 2.7 (4).

Παρακάτω αναφέρονται μερικές από τις μεθοδολογίες επιλογής του χωρίου Ω .

1. Θέσεις ιδιοτιμών στο μιγαδικό επίπεδο.

Όπως αναφέραμε στην Παράγραφο 2.3, το ψευδοφάσμα αποτελεί «επέκταση» του φάσματος του πίνακα, δηλαδή οι ιδιοτιμές του πίνακα περιέχονται σε αυτό. Είναι λοιπόν φυσικό να ξεκινήσουμε με ένα χωρίο το οποίο περιέχει τις ιδιοτιμές του πίνακα και μια περιοχή γύρω απ' αυτές, το μέγεθος της οποίας εξαρτάται από τον αριθμό ε για τον οποίο θα υπολογίσουμε το $\partial\Lambda_\varepsilon$. Με αυτή την τεχνική, το χωρίο συνήθως επιλέγεται να είναι το

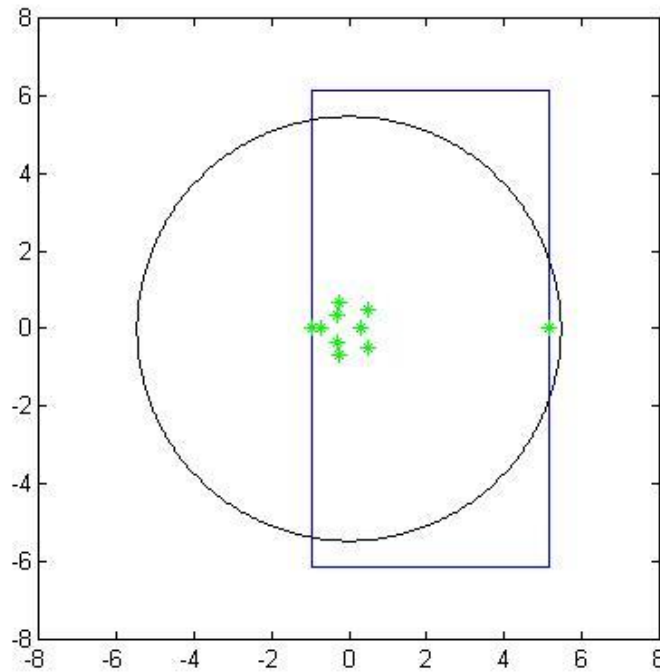
$$\left[\min_{1 \leq i \leq n} \operatorname{Re}(\lambda_i), \max_{1 \leq i \leq n} \operatorname{Re}(\lambda_i) \right] \times [-d, d]$$

Όπου $d = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_{i+1} - \lambda_i|$ και $\lambda_i, i=1, \dots, n$ οι ιδιοτιμές του πίνακα. Το χωρίο αυτό προφανώς περιέχει τις ιδιοτιμές του πίνακα και με βάση αυτό μπορούμε να αυξήσουμε τις διαστάσεις του για να εξασφαλίσουμε τη συμπερίληψη του ψευδοφάσματος σε αυτό για μεγαλύτερες τιμές του ε .

2. Χρήση της νόρμας-2 $\|\mathbf{A}\|_2$

Ως γνωστόν $\max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i| \leq \|\mathbf{A}\|_2$ και άρα έπεται ότι το φάσμα του \mathbf{A} περιέχεται στη σφαίρα $B(0, \|\mathbf{A}\|_2)$.

Συνεπώς το χωρίο του αλγορίθμου GRID μπορεί να επιλεγεί να είναι αυτή η σφαίρα του μιγαδικού επιπέδου ή κάποιο πολλαπλάσιό της. Το πρόβλημα της συγκεκριμένης μεθόδου είναι ότι η νόρμα-2 του πίνακα μπορεί να είναι πολύ μεγαλύτερη της φασματικής ακτίνας και έτσι, ο αλγόριθμος να οδηγηθεί σε πολύ περισσότερες SVD παραγοντοποιήσεις από τις απαραίτητες γεγονός που θα αυξήσει σημαντικά το χρόνο εκτέλεσής του.



Εικόνα 3. Το ορθογώνιο χωρίο της μεθόδου 1 και το κυκλικό της μεθόδου 2 και οι ιδιοτιμές ενός τυχαίου πίνακα 10×10 .

3. Χρήση των δίσκων Gerschgorin

Σύμφωνα με το Θεώρημα του Gerschgorin (Gerschgorin, 1931) ισχύει ότι

$\Lambda(\mathbf{A}) \subset \bigcup_{i=1}^n B\left(\alpha_{ii}, \sum_{i \neq j} |\alpha_{ij}|\right)$. Συνεπώς, μια καλή επιλογή του χωρίου θα μπορούσε να είναι ένα

ορθογώνιο που να περιέχει την παραπάνω ένωση των δίσκων Gerschgorin. Όμως, όπως και στην παραπάνω περίπτωση, το χωρίο μπορεί να είναι πολύ μεγαλύτερο από το ψευδοφάσμα.

4. Χρήση του Αριθμητικού Πεδίου του πίνακα (Field of Values)

ΟΡΙΣΜΟΣ 3.1. Έστω ένας πίνακας $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Ως αριθμητικό πεδίο (Field of Values, FoV) του \mathbf{A} ορίζεται το σύνολο των πηλίκων Rayleigh:

$$FoV(\mathbf{A}) = \left\{ \frac{\mathbf{z}^* \mathbf{A} \mathbf{z}}{\mathbf{z}^* \mathbf{z}}, \mathbf{z} \in \mathbb{C}^n \text{ με } \mathbf{z} \neq \mathbf{0} \right\}.$$

Έχει αποδειχθεί ότι το παραπάνω σύνολο είναι κυρτό και μάλιστα ότι αποτελεί το κυρτό κέλυφος του φάσματος του πίνακα, δηλαδή το ελάχιστο κυρτό σύνολο που το περιέχει. Με βάση τη συγκεκριμένη παρατήρηση και το παρακάτω θεώρημα συμπεραίνουμε ότι η χρήση του αριθμητικού πεδίου είναι μια από τις πιο αποδοτικές μεθόδους για την επιλογή του χωρίου Ω καθώς προσεγγίζει κατά πολύ το ψευδοφάσμα.

ΘΕΩΡΗΜΑ 3.2. Για κάθε $\varepsilon > 0$ ισχύει το εξής:

$$\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \subset \text{FoV}(\mathbf{A}) + B(0, \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2).$$

Απόδειξη. Για κάθε $\varepsilon > 0$, από τον ορισμό 2.7 (3) ισχύει ότι αν $z \in \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$ τότε $z \in \Lambda(\mathbf{A} + \mathbf{E})$, με $\|\mathbf{E}\|_2 \leq \varepsilon \leq \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2$ και άρα θα υπάρχει $\mathbf{v} \in \mathbb{C}^n$ τέτοιο ώστε $(\mathbf{A} + \mathbf{E})\mathbf{v} = z\mathbf{v}$. Χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε ότι $\|\mathbf{v}\|_2 = 1$ και πολλαπλασιάζοντας με \mathbf{v}^* έχουμε ότι

$$\mathbf{z} = \mathbf{v}^* \mathbf{A} \mathbf{v} + \mathbf{v}^* \mathbf{E} \mathbf{v}$$

και επιπλέον

$$\mathbf{v}^* \mathbf{E} \mathbf{v} \leq \|\mathbf{v}^*\|_2 \|\mathbf{E} \mathbf{v}\|_2 \leq \|\mathbf{E}\|_2 \leq \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2,$$

από όπου προκύπτει το ζητούμενο αφού και από τον Ορισμό 3.1 προκύπτει ότι κάθε σημείο του ψευδοφάσματος ανήκει και στο αριθμητικό πεδίο, επαυξημένο κατά $\varepsilon \|\mathbf{A}\|_2$. \square (Braconnier, McCoy, & Toumazou, 1997)

Συνοψίζοντας τις παραπάνω μεθόδους, παρατηρούμε ότι οι πρώτες τρεις δίνουν μεν χωρία τα οποία περιέχουν το φάσμα, άρα εύκολα κανείς συμπεραίνει ότι θα περιέχουν και το ψευδοφάσμα, αλλά μόνο για αρκετά μικρές τιμές του ε . Αντίθετα, η τέταρτη μέθοδος του αριθμητικού πεδίου δίνει σαφή εικόνα για το ψευδοφάσμα και γι' αυτό είναι η πλέον χρησιμοποιούμενη σε συναφείς αλγορίθμους, δύο από αυτούς αναλύουμε στη συνέχεια.

Το βασικότερο, λοιπόν, σημείο για την επιτυχή εκτέλεση του αλγορίθμου είναι η επιλογή του Ω . Η εξάρτηση του αλγορίθμου από την επιλογή αυτή είναι ένα από τα βασικότερά του προβλήματα διότι προφανώς ένα λάθος αρχικό χωρίο μπορεί να οδηγήσει σε σφάλμα, καθώς μπορεί το Ω να μην περιέχει ολόκληρο το ψευδοφάσμα ή ακόμα και κανένα σημείο του. Δεν είναι, όμως, δυνατό να ξέρουμε εκ των προτέρων ποιά είναι η καλύτερη επιλογή του χωρίου, διότι αυτό εξαρτάται από τη μορφή και τη γεωμετρία του ψευδοφάσματος πάνω στο μιγαδικό επίπεδο που δεν είναι γνωστή εξ' αρχής.

Ένα άλλο εξίσου σημαντικό πρόβλημα είναι ο αριθμός των SVD παραγοντοποιήσεων που γίνονται κατά την εκτέλεση του αλγορίθμου, καθώς αποτελούν το κύριο χρονικό κόστος του. Εάν το χωρίο Ω είναι πολύ μεγάλο (πχ. για μεγάλο ε) η χρονική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου είναι αποτρεπτική. Δεν υπάρχει όμως προοπτική για μείωση των SVD στη συγκεκριμένη υλοποίηση καθώς ο αλγόριθμος δεν μπορεί να αποφανθεί εάν δεν υπολογίζει την $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ για κάθε σημείο του πλέγματος.

Παρά ταύτα, ο αλγόριθμος GRID έχει ένα πολύ σημαντικό πλεονέκτημα, εκτός από αυτό της απλότητας. Μπορούμε πολύ εύκολα να εισάγουμε μεθόδους παραλληλισμού στον αλγόριθμο, έτσι ώστε να υπολογίζεται το ψευδοφάσμα του πίνακα για περισσότερες της μιας τιμές του ε με μια μόνο εκτέλεση και χωρίς να περιπλέκεται η ιδέα του αλγορίθμου. Συγκεκριμένα, όπως αναφέραμε, κατά την εκτέλεση του αλγορίθμου υπολογίζεται η $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ για κάθε σημείο z του πλέγματος. Αν λοιπόν ο αλγόριθμος αποθηκεύσει τις παραπάνω τιμές, μπορεί μετά πολύ εύκολα να σχεδιάσει τις καμπύλες του $\partial\Lambda_\varepsilon$ για διαφορετικές τιμές του ε χωρίς εκ νέου SVD παραγοντοποιήσεις για κάθε ε . Ο συγκεκριμένος τρόπος εκμετάλλευσης του παραλληλισμού είναι επίσης ιδιαίτερα απλός σε σχέση με αυτούς που χρησιμοποιούνται από τους άλλους αλγορίθμους που θα μελετήσουμε στα επόμενα κεφάλαια.

Βέβαια, η επιτυχής εκτέλεση προϋποθέτει το ψευδοφάσμα να ανήκει ολόκληρο στο αρχικό χωρίο που επιλέγει ο αλγόριθμος για κάθε τιμή του ε . Κάτι τέτοιο εξασφαλίζεται ξεκινώντας τον αλγόριθμο και υπολογίζοντας το χωρίο για τη μεγαλύτερη τιμή του ε , αφού το μέγεθος του ψευδοφάσματος μικραίνει όσο μικραίνει και το ε .

Τελειώνοντας σημειώνεται ότι ο σχεδιασμός των καμπυλών μπορεί να γίνει ταυτόχρονα αν ο αλγόριθμος εκτελεστεί σε ένα σύστημα υπολογιστών με παράλληλους επεξεργαστές, μια μέθοδο που όπως θα δούμε και στα παρακάτω κεφάλαια χρησιμοποιείται ευρέως στην εύρεση ψευδοφάσματος και από πολλούς διαφορετικούς αλγορίθμους.

3.1 Ανάλυση και υλοποίηση

Ο αλγόριθμος GRID για την εύρεση του ψευδοφάσματος για μια τιμή του ε αναλύεται σε δυο βασικά βήματα. Στο πρώτο βήμα γίνεται η επιλογή του χωρίου Ω και στο δεύτερο, για κάθε σημείο του πλέγματος υπολογίζεται η $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ και τελικά προσδιορίζονται τα σημεία του Ω που ανήκουν στο $\partial\Lambda_\varepsilon$.

Για την επιλογή του Ω θα χρησιμοποιήσουμε την απλούστερη μορφή της μεθόδου 4. Συγκεκριμένα, αν θεωρήσουμε το ερμιτιανό και το αντιερμιτιανό μέρος του πίνακα \mathbf{A} , συγκεκριμένα

$$\mathbf{A}_H = \frac{\mathbf{A} + \mathbf{A}^*}{2}, \quad \mathbf{A}_{SH} = \frac{\mathbf{A} - \mathbf{A}^*}{2}$$

τότε ως γνωστόν ισχύει ότι $FoV(\mathbf{A}_H) = \text{Re } FoV(\mathbf{A})$ και $FoV(\mathbf{A}_{SH}) = i \text{Im } FoV(\mathbf{A})$, και άρα μπορούμε να ορίσουμε ως Ω το

$$\Omega = \left[\lambda_{\min}(\mathbf{A}_H) - \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2, \lambda_{\max}(\mathbf{A}_H) + \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2 \right] \times \left[\lambda_{\min}(\mathbf{A}_{SH}) - \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2, \lambda_{\max}(\mathbf{A}_{SH}) + \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2 \right].$$

(Koutis & Gallopoulos, 2000)

Η παραπάνω ανάλυση συνοψίζεται στον παρακάτω ψευδοκώδικα:

ΕΙΣΟΔΟΣ:

$$\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}, \varepsilon > 0$$

N , ο αριθμός των σημείων του πλέγματος σε κάθε άξονα

ΒΗΜΑ 1: Ορισμός των ορίων του πλέγματος και των βημάτων

$$x_{\min} = \lambda_{\min}(\mathbf{A}_H) - \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2, \quad x_{\max} = \lambda_{\max}(\mathbf{A}_H) + \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2$$

$$y_{\min} = \lambda_{\min}(\mathbf{A}_{SH}) - \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2, \quad y_{\max} = \lambda_{\max}(\mathbf{A}_{SH}) + \varepsilon \|\mathbf{A}\|_2$$

$$xstep = \frac{x_{\max} - x_{\min}}{N}, \quad ystep = \frac{y_{\max} - y_{\min}}{N}$$

ΒΗΜΑ 2:

Για κάθε σημείο (x, y) του πλέγματος

$$z = x + iy$$

Υπολογισμός της $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$

Τέλος_επανάληψης

Σχεδιάζονται τα σημεία εκείνα για τα οποία ισχύει $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \varepsilon$

Τέλος.

Για τον υπολογισμό του Λ_ε για περισσότερα ε ο αλγόριθμος εκτελεί την παραπάνω διαδικασία μόνο για το μεγαλύτερο εξ' αυτών και απλώς εκτελείται η τελευταία εντολή για κάθε τιμή.

3.2 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση Εκτέλεσης

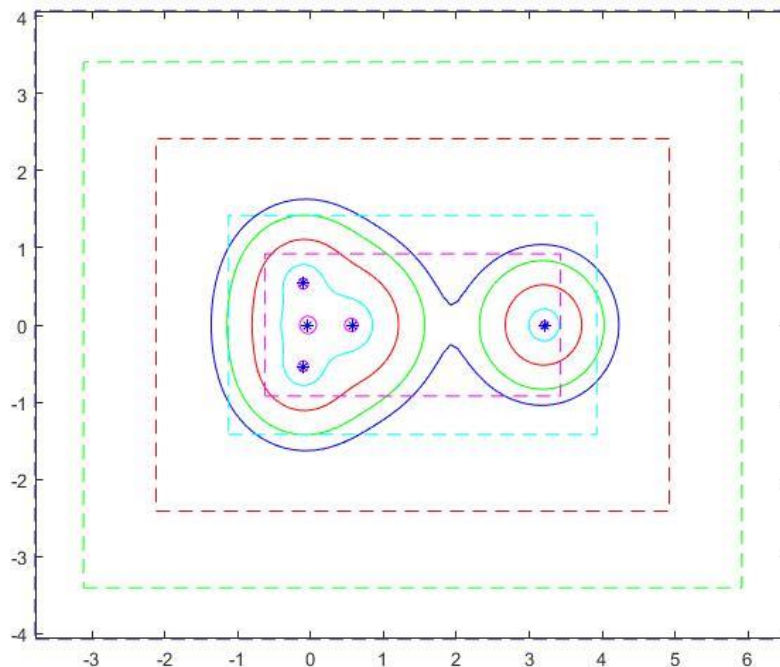
Ο ψευδοκώδικας της προηγούμενης παραγράφου υλοποιήθηκε, στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής εργασίας, σε αλγόριθμο στο MATLAB και η σχεδίαση $\partial\Lambda_\varepsilon$ του έγινε με χρήση της εντολής contour σε επίπεδο ε για έναν πίνακα που περιέχει τις τιμές $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$. Σκοπός μας στο σημείο αυτό είναι να επαληθεύσουμε την ορθότητα της μεθόδου επιλογής του χωρίου Ω που χρησιμοποιήσαμε αλλά και το μέγεθος αυτού σε σχέση με το ψευδοφάσμα για διαφορετικούς πίνακες και τιμές του ε .

Ξεκινάμε με ένα απλό παράδειγμα ενός τυχαίου πίνακα $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{5 \times 5}$:

$\mathbf{A} =$

0.8147	0.0975	0.1576	0.1419	0.6557
0.9058	0.2785	0.9706	0.4218	0.0357
0.1270	0.5469	0.9572	0.9157	0.8491
0.9134	0.9575	0.4854	0.7922	0.9340
0.6324	0.9649	0.8003	0.9595	0.6787

Παρακάτω παρουσιάζεται το ψευδοφάσμα του \mathbf{A} για διαφορετικές τιμές του ε καθώς και το χωρίο Ω που κατασκεύασε ο αλγόριθμος για κάθε περίπτωση. Αρχικά ο αλγόριθμος εκτελείται στο σύνολό του και το αρχικό χωρίο Ω θα υπολογίζεται για κάθε τιμή του ε με σκοπό την πειραματική του απεικόνιση και τη μελέτη του μεγέθους του σε όλες τις περιπτώσεις.



Εικόνα 4: Το ψευδοφάσμα του πίνακα \mathbf{A} , όπως υπολογίστηκε από τον αλγόριθμο GRID καθώς και το χωρίο Ω για $\varepsilon = 1, 0.8, 0.5, 0.2, 0.005$.

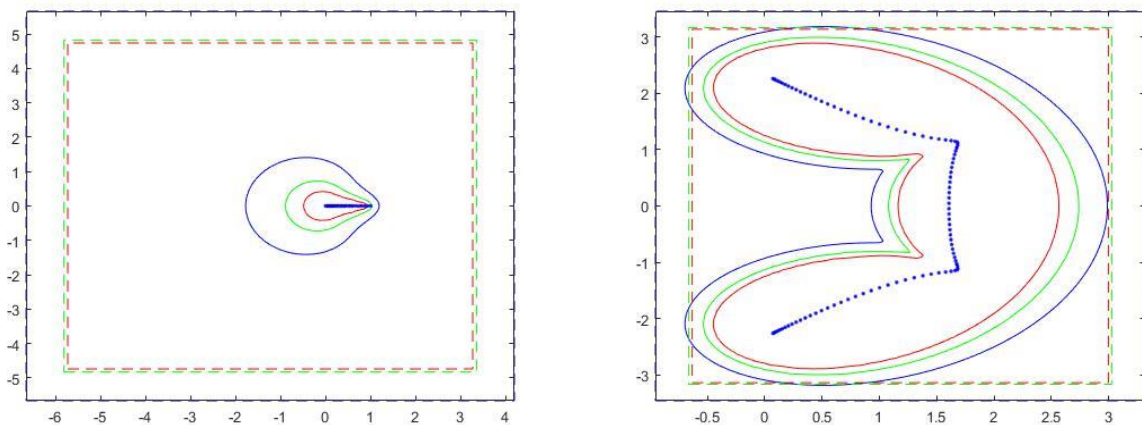
Στην Εικόνα 4 βλέπουμε ότι πράγματι, το χωρίο Ω περιέχει όλο το ψευδοφάσμα για την εκάστοτε τιμή του ε . Παρ' όλα αυτά, παρατηρούμε ότι ακόμα και με τη χρήση της βέλτιστης μεθόδου για την επιλογή του Ω , ο αλγόριθμος εξετάζει έναν αριθμό σημείων πολύ μεγαλύτερο του απαιτούμενου και συνεπώς, γίνονται αχρείαστα πολλές SVD παραγοντοποιήσεις.

Το γεγονός αυτό, δεν παρουσιάζει ιδιαίτερο πρόβλημα όταν πρόκειται για μικρούς πίνακες όπως ο παραπάνω. Συγκεκριμένα, για τον πίνακα \mathbf{A} ο αλγόριθμος τερμάτιζε σε περίπου 0.06 sec για κάθε τιμή του ε . Ο χρόνος αυτός είναι βέβαια πολύ μικρός στη συγκεκριμένη περίπτωση, αλλά αν

θέλουμε να υπολογίσουμε το ψευδοφάσμα για ακόμα περισσότερες τιμές ή αν πρόκειται για περιπτώσεις πολύ μεγαλύτερων και ιδιόμορφων πινάκων, ίσως γίνει αρκετά μεγάλος. Για το λόγο αυτό, όπως αναφέραμε και την αρχή του κεφαλαίου, προτιμούμε ο αλγόριθμος να υπολογίζει το Ω εκτελεί τις SVD παραγοντοποιήσεις μόνο για τη μεγαλύτερη τιμή του ε , και στη συνέχεια απλώς να σχεδιάζει τις καμπύλες για τις διαφορετικές τιμές του ε , κάτι που δεν κοστίζει ιδιαίτερα πολύ χρόνο εκτέλεσης.

Ακολουθώντας αυτή τη μέθοδο ο αλγόριθμος χρειάστηκε συνολικά 0.06 sec για τον συνολικό υπολογισμό όλων των καμπυλών.

Παρακάτω εξετάζουμε την περίπτωση μεγαλύτερων πινάκων, κάνοντας χρήση δύο τύπων πινάκων ευρέως χρησιμοποιούμενων σε παραδείγματα αλγορίθμων ψευδοφάσματος και με ξεχωριστή δομή ιδιοτιμών στο μιγαδικό επίπεδο, τους πίνακες Kahan και Toeplitz.



Εικόνα 5: Τα αποτελέσματα του αλγορίθμου GRID τους πίνακες Kahan (αριστερά) και Toeplitz (δεξιά) μεγέθους 100, για $\varepsilon = 0.1$, 0.01, 0.001 αντίστοιχα.

Για τα αποτελέσματα της παραπάνω εικόνας ο αλγόριθμος χρειάστηκε περίπου 12 sec για την κάθε καμπύλη του πίνακα Kahan και περίπου 9 sec για κάθε καμπύλη του πίνακα Toeplitz.

Παρατηρούμε, λοιπόν, ότι αυξανόμενου του μεγέθους του εκάστοτε πίνακα, ο χρόνος εκτέλεσης του αλγορίθμου αυξάνεται σημαντικά.

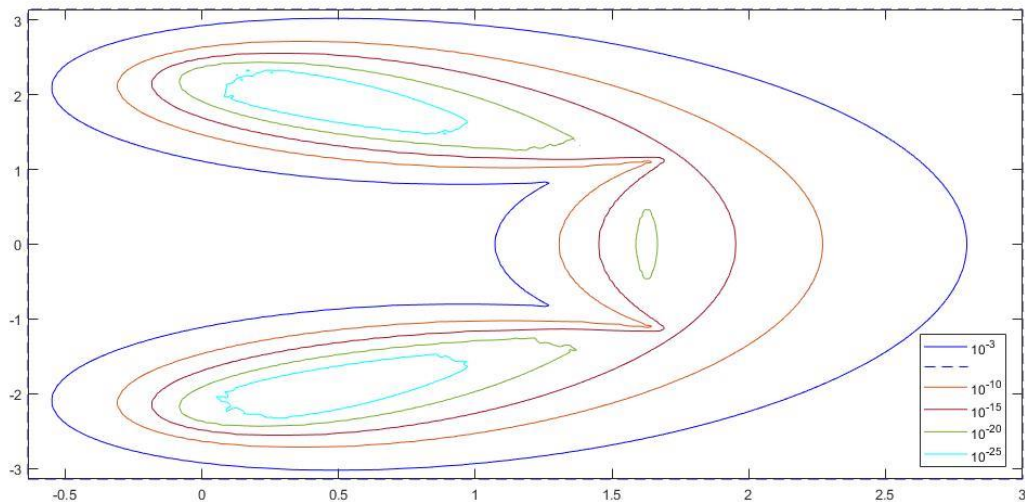
Ακόμα ένα πολύ σημαντικό συμπέρασμα από τα παραπάνω διαγράμματα είναι το πολύ μεγάλο μέγεθος το χωρίου Ω για μεγαλύτερες τιμές του ε . Παρατηρούμε ότι η διαφορά μεγέθους των χωρίων στις περιπτώσεις $\varepsilon = 0.1$ και $\varepsilon = 0.01$ είναι πολύ μεγαλύτερη από αυτή στις περιπτώσεις $\varepsilon = 0.01$ και $\varepsilon = 0.001$, παρά το γεγονός ότι η διαφορά τάξης μεγέθους των ε είναι η ίδια.

Εντούτοις, σε αντίθεση με το προηγούμενο παράδειγμα, διαφέρει πολύ λιγότερο μεταξύ των διαφορετικών ε .

Συμπεραίνουμε λοιπόν ότι πράγματι, ο εκ νέου υπολογισμός του χωρίου για κάθε διαφορετικό ε είναι περιττός.

Παρά τα προαναφερθέντα μειονεκτήματα, όπως είπαμε ο αλγόριθμος GRID είναι, με κατάλληλη προφανώς επιλογή χωρίου, ιδιαίτερα σταθερός και απλός και είναι βέβαιο ότι θα δώσει το σωστό αποτέλεσμα κάνοντας μάλιστα απλή και ταυτόχρονα πολύ αποτελεσματική εκμετάλλευση παραλληλισμού.

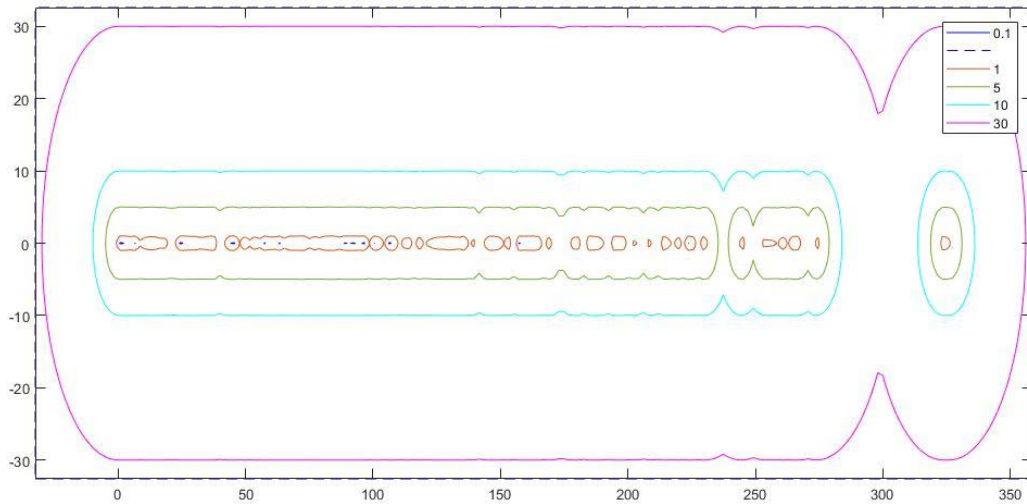
Η χρήση του παραλληλισμού παρουσιάζεται σύντομα στο επόμενο παράδειγμα. Ξεκινάμε υπολογίζοντας το ψευδοφάσμα του πίνακα Toeplitz μεγέθους 200 για $\varepsilon = 10^{-3}$. Ο αλγόριθμος χρειάστηκε 200 sec για να υπολογίσει τη συγκεκριμένη καμπύλη. Στη συνέχεια απλώς κάναμε contour plots στο ήδη υπάρχον grid για διάφορες τιμές του ε , όπως φαίνεται στην Εικόνα 6. Κάθε τέτοιο plot εκτελείται άμεσα, οπότε ο συνολικός χρόνος εκτέλεσης του αλγορίθμου προσεγγίζεται από το χρόνο τον οποίο χρειάστηκε για να υπολογίσει την για $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ κάθε z σημείο του GRID, ανεξαρτήτως από τον αριθμό των καμπυλών που θα υπολογιστούν στη συνέχεια.



Εικόνα 6: Το ψευδοφάσμα του πίνακα Toeplitz μεγέθους 200 για τις διάφορες τιμές του ε .

Τελειώνοντας την ανάλυση του αλγορίθμου GRID, παρακάτω παρουσιάζεται μια περίπτωση πίνακα, συγκεκριμένα ένας θετικός και συμμετρικός πίνακας Toeplitz, για τον οποίο μπορούμε να κάνουμε χρήση παραλληλισμού και να υπολογίζουμε το ψευδοφάσμα του για τιμές του ε μεγαλύτερες της αρχικής. Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι, όπως και σε προηγούμενα παραδείγματα, το χωρίο Ω είναι πολύ μεγαλύτερο από την αρχική καμπύλη που υπολογίζει. Στην προκειμένη περίπτωση, με χρήση το χωρίου που δημιουργήθηκε για τον υπολογισμό του ψευδοφάσματος για $\varepsilon = 0.1$ (η καμπύλη του οποίου φαίνεται ελάχιστα αφού είναι πάρα πολύ μικρή σε σχέση με το χωρίο Ω), μπορέσαμε να υπολογίζουμε το ψευδοφάσμα του πίνακα ως και για

$\varepsilon = 30$. Ο συνολικός χρόνος εκτέλεσης ήταν περίπου 185 sec. Στο σημείο αυτό αναφέρουμε ότι ο αριθμός των επιπέδων ψευδοφάσματος που μπορούμε τελικά να υπολογίσουμε με το ίδιο χωρίο εξαρτάται από το μέγεθος των δύο αυτών σχημάτων του επιπέδου και προφανώς καθορίζεται μόνο πειραματικά.



Εικόνα 7: Το ψευδοφάσμα του θετικού συμμετρικού πίνακα Toeplitz.

Στο επόμενο κεφάλαιο θα μελετήσουμε μια παραλλαγή του αλγορίθμου GRID, στόχος της οποίας είναι η μείωση της πολυπλοκότητας του αλγορίθμου χωρίς να αναιρείται η σταθερότητά του.

4. Ο αλγόριθμος Inclusion-Exclusion: Βελτίωση του αλγορίθμου GRID

Από την ανάλυση του Κεφαλαίου 3, συμπεράναμε ότι ο αλγόριθμος GRID είναι εξαιρετικά σταθερός και δίνει σίγουρα σωστά αποτελέσματα, αλλά ταυτόχρονα είναι και εξαιρετικά χρονοβόρος. Το βασικό πρόβλημα είναι η μορφή και το μέγεθος του χρησιμοποιούμενου χωρίου Ω , καθώς αυτό πρέπει να είναι τέτοιο ώστε αφενός να περιέχει ολόκληρο το ψευδοφάσμα για την συγκεκριμένη τιμή του ε και αφετέρου να μην είναι πολύ μεγαλύτερο απ' αυτό, έτσι ώστε να μην γίνονται πολύ περισσότερες SVD παραγοντοποιήσεις από όσες χρειάζονται. Είδαμε όμως ότι η καλή προσαρμογή του χωρίου Ω δεν είναι εύκολο να επιτευχθεί, χωρίς τουλάχιστον ο αλγόριθμος να γίνει πολύ περίπλοκος, γεγονός που αντιτίθεται με την απλότητα με την οποία υπολογίζει το Λ_ε . Συνεπώς, προκύπτει το ερώτημα αν μπορούμε, δεδομένου ενός αρχικού χωρίου, χωρίς να αλλάξει η μέθοδος υπολογισμού του, να μειώσουμε τον αριθμό των σημείων τα οποία θα εξετάσουμε αν ανήκουν ή όχι εντός (ή στο σύνορο) του Λ_ε .

Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με έναν αλγόριθμο που υλοποιεί την παραπάνω υπόθεση, τον αλγόριθμο Inclusion-Exclusion (IE) ο οποίος αναπτύχθηκε από τους Ιωάννη Κούτη και Ευστράτιο Γαλλόπουλο. Η ιδέα του αλγορίθμου ξεκινά από ένα χωρίο Ω το οποίο γνωρίζουμε ότι περιέχει το Λ_ε (inclusion region) και στη συνέχεια αποκλείει κάποια από τα σημεία στο πλέγμα το συγκεκριμένου χωρίου. Συγκεκριμένα, θα δείξουμε ότι για όποιο $z \in \Omega$ γνωρίζουμε την τριπλέτα $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ που δίνεται κάνοντας μια SVD παραγοντοποίηση του πίνακα $z\mathbf{I} - \mathbf{A}$, μπορούμε πιθανώς να κατασκευάσουμε ένα exclusion region, δηλαδή μια περιοχή η οποία δεν έχει κανένα κοινό σημείο με το ψευδοφάσμα του \mathbf{A} . Θα δείξουμε επίσης ότι ο αλγόριθμος δεν είναι τόσο ευαίσθητος στην αρχική επιλογή του χωρίου Ω , διότι ακόμα και αν αυτό είναι πολύ μεγαλύτερο από το Λ_ε , θα οδηγηθούμε σε γρήγορο αποκλεισμό περιοχών του.

Ξεκινάμε την ανάλυση του αλγορίθμου παρουσιάζοντας ορισμένα θεωρήματα πάνω στα οποία βασίζεται. Σημειώνεται ότι στα παρακάτω συμβολίζουμε με $D(z, r)$ και $D^\circ(z, r)$ τον κλειστό και ανοιχτό δίσκο αντίστοιχα, με κέντρο z και ακτίνα r , και με D^c το συμπλήρωμα κάποιου δίσκου.

ΟΡΙΣΜΟΣ 4.1. Μια περιοχή Δ του μιγαδικού επιπέδου λέγεται περιοχή αποκλεισμού (exclusion region) για το Λ_ε κάποιου πίνακα \mathbf{A} αν και μόνο αν $\Delta \cap \Lambda_\varepsilon = \emptyset$.

Το πρώτο θεώρημα που παρουσιάζουμε δίνει έναν τρόπο εύρεσης μιας περιοχής αποκλεισμού δεδομένης της $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$, της ποσότητας δηλαδή που ο αλγόριθμος GRID υπολογίζει σε κάθε σημείο του Ω .

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.2. *Εάν $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) = r > \varepsilon$ τότε $D^\circ(z, r - \varepsilon) \cap \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) = \emptyset$.*

Απόδειξη. Γνωρίζουμε ότι για δύο πίνακες $\mathbf{B}, \mathbf{C} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ισχύει το εξής.

$$|s_{\min}(\mathbf{B} + \mathbf{C}) - s_{\min}(\mathbf{B})| \leq s_{\max}(\mathbf{C})$$

Έστω, λοιπόν, $\tilde{z} \in D^\circ(z, r - \varepsilon)$. Θα δείξουμε ότι $s_{\min}(\tilde{z}\mathbf{I} - \mathbf{A}) > \varepsilon$.

Έχουμε ότι $\tilde{z}\mathbf{I} - \mathbf{A} = z\mathbf{I} - \mathbf{A} - (z\mathbf{I} - \tilde{z}\mathbf{I})$ και άρα, προκύπτει ότι

$$|s_{\min}(\tilde{z}\mathbf{I} - \mathbf{A}) - s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})| \leq s_{\max}(z\mathbf{I} - \tilde{z}\mathbf{I}) = |z - \tilde{z}|$$

δηλαδή

$$-|z - \tilde{z}| \leq s_{\min}(\tilde{z}\mathbf{I} - \mathbf{A}) - s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) \leq |z - \tilde{z}|.$$

Επομένως, αφού $\tilde{z} \in D^\circ(z, r - \varepsilon)$, είναι $|z - \tilde{z}| < r - \varepsilon$ και άρα, η σχέση γίνεται

$$\varepsilon - r < s_{\min}(\tilde{z}\mathbf{I} - \mathbf{A}) - r,$$

οπότε πράγματι $s_{\min}(\tilde{z}\mathbf{I} - \mathbf{A}) > \varepsilon$. \square

Άρα λοιπόν, ο δίσκος $D^\circ(z, r - \varepsilon)$ είναι μια περιοχή αποκλεισμού. Στην περίπτωση που ο \mathbf{A} είναι κανονικός, αποδεικνύεται ότι ο δίσκος του Θεωρήματος 4.2. είναι μεγιστοτικός.

ΠΟΡΙΣΜΑ 4.3. *Έστω \mathbf{A} ένας κανονικός πίνακας και $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) = r > \varepsilon$. Τότε το σύνολο $\partial D(z, r - \varepsilon)$ περιέχει τουλάχιστον ένα σημείο του $\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$.*

Απόδειξη. Από υπόθεση ισχύει ότι $z \in \Lambda_r(\mathbf{A})$. Επιπλέον, από το Πόρισμα 2.18, αφού ο \mathbf{A} είναι

κανονικός, $\Lambda_r(\mathbf{A}) = \bigcup_{\lambda_i \in \Lambda(\mathbf{A})} D(\lambda_i, \kappa(\mathbf{S}))$, και άρα υπάρχει μια ιδιοτιμή λ_k του \mathbf{A} τέτοια ώστε

$z \in \partial D(z_k, r)$. Συνεπώς οι δίσκοι $D(z_k, r)$ και $D(z, r - \varepsilon)$ έχουν ένα ακριβώς κοινό σημείο, το z .

\square (Koutis & Gallopoulos, 2000)

Συνεχίζοντας την ενασχόληση με κανονικούς πίνακες, το επόμενο θεώρημα είναι επίσης ενδιαφέρον.

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.4. Αν $\mathbf{N} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ένας κανονικός πίνακας, τότε για οποιονδήποτε πίνακα $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}$ ο οποίος έχει ακριβώς τις ίδιες ιδιοτιμές με τον \mathbf{N} και για κάθε $z \in \mathbb{C}$, αν $r_{\mathbf{A}} = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ και $r_{\mathbf{N}} = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{N})$ μεγαλύτερα του μηδενός, ισχύει το παρακάτω:

$$D(z, r_{\mathbf{A}} - \varepsilon) \subset D(z, r_{\mathbf{N}} - \varepsilon).$$

Επιπλέον, ο δίσκος αποκλεισμού $D(z, r - \varepsilon)$ θα είναι ο ίδιος για κάθε άλλο κανονικό πίνακα με τις ίδιες ιδιοτιμές.

Απόδειξη. Γνωρίζουμε ότι $|\lambda_{\min}(\mathbf{A})|^{-1} \leq \|\mathbf{A}^{-1}\| = s_{\min}^{-1}(\mathbf{A})$. Συνεπώς, αφού οι \mathbf{A} και \mathbf{N} έχουν τις ίδιες ιδιοτιμές, έχουμε ότι $s_{\min}(\mathbf{A}) \leq |\lambda_{\min}(\mathbf{A})| = s_{\min}(\mathbf{N})$ από όπου προκύπτει το ζητούμενο.

Επιπλέον, έστω $\tilde{\mathbf{N}}$ ένας κανονικός πίνακας με ίδιες ιδιοτιμές με τον \mathbf{N} . Τότε,

$s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{N}) = |\lambda_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{N})| = |\lambda_{\min}(z\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{N}})| = s_{\min}(z\mathbf{I} - \tilde{\mathbf{N}})$, από όπου προκύπτει το δεύτερο αποτέλεσμα. \square (Koutis & Gallopoulos, 2000)

Το Θεώρημα 4.2 δίνει μια σίγουρη και αποτελεσματική μέθοδο για την εύρεση περιοχών αποκλεισμού και από τα Θεωρήματα 4.3 και 4.4 προκύπτει ότι η μέθοδος αυτή δίνει τη μεγαλύτερη περιοχή αποκλεισμού στην περίπτωση κανονικών πινάκων.

Εντούτοις, για μη-κανονικούς πίνακες και όσο περισσότερο κάποιος πίνακας «απέχει» από την κανονικότητα, η περιοχή του Θεωρήματος 4.2 γίνεται όλο και μικρότερη, με αποτέλεσμα να μην επιτυγχάνεται αρκετά σημαντική μείωση των SVD παραγοντοποιήσεων σε σχέση με τον απλό αλγόριθμο GRID.

Για το λόγο αυτό, προτείνεται άλλη μια μέθοδος αποκλεισμού, για την οποία χρειάζεται να ορίσουμε την παρακάτω έννοια.

ΟΡΙΣΜΟΣ 4.5. Έστω $g_{\mathbf{A}}(z) = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) = s_{\min}((x+iy)\mathbf{I} - \mathbf{A})$, όπου $z = x+iy \in \mathbb{C} \setminus \Lambda(\mathbf{A})$. Θα λέμε εναισθησία του ψευδοφάσματος του \mathbf{A} στο σημείο z_0 την ποσότητα

$$pss_{\mathbf{A}}(z_0) = \left| \nabla g_{\mathbf{A}}(z) \right|_{z=z_0}^{-1}.$$

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.6. Έστω $x+iy \in \mathbb{C} \setminus \Lambda(\mathbf{A})$. Τότε η $g(x, y)$ είναι αναλυτική σε μια περιοχή του (x, y) αν η $s_{\min}((x+iy)\mathbf{I} - \mathbf{A})$ είναι μια απλή ιδιάζουσα τιμή. Το ανάδελτα δε της $g(x, y)$ δίνεται από τον τύπο

$$\nabla g(x, y) = \left(\operatorname{Re}(\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}), \operatorname{Im}(\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}) \right) = \mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}$$

όπου \mathbf{u}_{\min} και \mathbf{v}_{\min} τα αριστερά και δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα της $g(x, y) = s_{\min}$.

Το Θεώρημα 4.6 υποδεικνύει ότι ο υπολογισμός της ευαισθησίας είναι απλός και χρειάζεται μόνο τον υπολογισμό της τριπλέτας στο σημείο z . Σημειώνεται ότι το συγκεκριμένο θεώρημα είναι εξαιρετικά σημαντικό για την επόμενη κατηγορία αλγορίθμων που θα μελετήσουμε στα επόμενα κεφάλαια.

ΠΟΡΙΣΜΑ 4.7. *Ο συντελεστής ευαισθησίας του ψευδοφάσματος του \mathbf{A} σε κάθε σημείο z για το οποίο η ποσότητα $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ είναι απλή δίνεται από τον τύπο*

$$pss_{\mathbf{A}}(z) = \frac{1}{|\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}|} \geq 1 \quad (4.1)$$

αφού τα ιδιάζοντα διανύσματα είναι μοναδιαία. Αν δε ο \mathbf{A} είναι κανονικός, τότε $pss_{\mathbf{A}}(z) = 1, \forall z \in \mathbb{C} \setminus \Lambda(\mathbf{A})$.

Το γεγονός ότι η g είναι αναλυτική δίνει μια σημαντική συσχέτιση μεταξύ αυτής και των ευθυγράμμων τμημάτων του μιγαδικού επιπέδου, που απεικονίζεται στο παρακάτω.

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.8. *Έστω $z_0 = x_0 + iy_0$ και $z_1 = x_1 + iy_1$ δύο σημεία του μιγαδικού επιπέδου και έστω ότι ορίζεται η ευαισθησία $pss_{\mathbf{A}}$ του ψευδοφάσματος ενός πίνακα \mathbf{A} στα σημεία αυτά καθώς και σε κάθε σημείο στο ευθύγραμμο τμήμα που ορίζουν, έστω L . Τότε, αν $pss_{\mathbf{A}}(z_0) < pss_{\mathbf{A}}(z_1), \forall z \in L$ ισχύει το εξής*

$$|g(x_1, y_1) - g(x_0, y_0)| pss_{\mathbf{A}}(z_0) \leq |z_1 - z_0|.$$

Απόδειξη. Εξ' ορισμού, ισχύει ότι $g(x, y) - g(x_0, y_0) = \oint_{(x_0, y_0)}^{(x, y)} \nabla g(x, y) \bar{\mathbf{n}}_L dL$, όπου $\bar{\mathbf{n}}_L$ το μοναδιαίο διάνυσμα του L . Τότε

$$\begin{aligned} |g(x_1, y_1) - g(x_0, y_0)| &= \left| \oint_{(x_0, y_0)}^{(x_1, y_1)} \nabla g(x, y) \bar{\mathbf{n}}_L dL \right| \leq \oint_{(x_0, y_0)}^{(x_1, y_1)} |\nabla g(x, y) \bar{\mathbf{n}}_L| dL \\ &= \oint_{(x_0, y_0)}^{(x_1, y_1)} pss_{\mathbf{A}}(z)^{-1} dL \leq pss_{\mathbf{A}}(z_0)^{-1} \oint_{(x_0, y_0)}^{(x_1, y_1)} dL = pss_{\mathbf{A}}(z_0)^{-1} |z_1 - z_0| \end{aligned}$$

□ (Koutis & Gallopoulos, 2000)

Με τη βοήθεια, λοιπόν του Θεωρήματος 4.8, μπορούμε να διατυπώσουμε άλλη μια μέθοδο αποκλεισμού, ως παρακάτω.

ΘΕΩΡΗΜΑ 4.9. Έστω ότι ισχύουν οι υποθέσεις του Θεωρήματος 4.8, με $z_1 \in \partial\Lambda_\varepsilon(\mathbf{A})$. Ορίζουμε την ποσότητα $R = (g(z_0) - \varepsilon) p_{SS_A}(z_0)$. Τότε $D^c(z_0, R) \cap \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}) \neq \emptyset$. Επιπλέον, αν το z_1 ελαχιστοποιεί την απόσταση $d(z_0, \Lambda_\varepsilon(\mathbf{A}))$ τότε ο δίσκος $D^\circ(z_0, R)$ είναι περιοχή αποκλεισμού.

Παρατηρούμε ότι αν ο \mathbf{A} είναι κανονικός, το Θεώρημα 4.9 είναι ισοδύναμο με το Θεώρημα 4.2, το οποίο ισχύει χωρίς απαραίτητα να ισχύουν οι υποθέσεις του Θεωρήματος 4.8. (Koutis & Galloroulos, 2000)

4.1 Ανάλυση βημάτων και υλοποίηση

Η θεωρητική αυτή ανάλυση οδηγεί σε δύο παρόμοιους αλγορίθμους, που ονομάζουμε Standard Inclusion-Exclusion και Large Inclusion-Exclusion, έναν για κάθε θεώρημα αποκλεισμού όπως αυτά περιγράφονται παραπάνω και οι οποίοι λειτουργούν ως εξής. Δεδομένου ενός πλέγματος του επιπέδου, ο σκοπός είναι να κατηγοριοποιηθούν τα σημεία του ως “in”, αν ανήκουν εντός ή στο σύνορο του ψευδοφάσματος ή “out” διαφορετικά. Αρχικά, θεωρούμε ότι όλα τα σημεία ανήκουν στο Λ_ε και διαπερνάμε το πλέγμα σε μια δεδομένη κατεύθυνση. Έστω z το σημείο το οποίο εξετάζουμε. Τα βήματα των αλγορίθμων είναι τα εξής.

ΒΗΜΑ 0. Υπολογισμός της $g_A(z) = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$.

Αν $g_A(z) \leq \varepsilon$ τότε το z κατηγοριοποιείται ως “in”. Διαφορετικά, συνεχίσουμε στο Βήμα 1 του κάθε αλγορίθμου.

Standard IE

ΒΗΜΑ 1: Υπολογισμός του δίσκου με κέντρο το z και ακτίνα $r = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) - \varepsilon$ και αποκλεισμός των εσωτερικών του σημείων σύμφωνα με το Θεώρημα 4.2.

Large IE

ΒΗΜΑ 1: Υπολογισμός του δίσκου με κέντρο το z και ακτίνα $R = [s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) - \varepsilon] p_{SS_A}(z)$.

Σύμφωνα με το Θεώρημα 4.9 τα εσωτερικά σημεία του δίσκου είναι υποψήφια για αποκλεισμό. Γενικά, κατά πάσα πιθανότητα, όλα αυτά τα σημεία μπορούν να αποκλειστούν. Παρ’ όλα αυτά, στη συνέχεια ο συγκεκριμένος αλγόριθμος προχωρά στο Βήμα 2 σε μια διόρθωση έτσι ώστε να ανακτήσει τυχόν λανθασμένα αποκλεισμένα σημεία.

ΒΗΜΑ 2: Η διόρθωση γίνεται σε δύο βήματα.

ΒΗΜΑ 2α

Ελέγχουμε αν ο δίσκος περιέχει κάποια σημεία \hat{z} για τα οποία ήδη γνωρίζουμε ότι ανήκουν στο Λ_ε . Αν υπάρχει έστω ένα τέτοιο σημείο, αποκλείονται τελικά μόνο τα σημεία του δίσκου $D^\circ(z, s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}))$.

ΒΗΜΑ 2β

Εξετάζουμε όλα τα αποκλεισμένα σημεία τα οποία είναι γειτονικά κάποιου σημείου το οποίο γνωρίζουμε ότι ανήκει στο Λ_ε και ελέγχουμε αν αυτά τα σημεία ικανοποιούν τη σχέση $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) < \varepsilon$. Αν ναι, για κάθε τέτοιο σημείο βρίσκουμε το κέντρο \hat{z} του δίσκου ο οποίος οδήγησε στον αποκλεισμό του και κατηγοριοποιούμε τα σημεία του ως “in” και επαναλαμβάνουμε εκ νέου τη διαδικασία, αποκλείοντας αυτή τη φορά τα σημεία του δίσκου $D^\circ(\hat{z}, s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}))$.

Τα παραπάνω συνοψίζονται στον ψευδοκώδικα που ακολουθεί.

ΕΙΣΟΔΟΣ:

$$\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}, \varepsilon > 0$$

N , ο αριθμός των σημείων του πλέγματος σε κάθε άξονα

Το πλέγμα Ω κατασκευάζεται όπως ακριβώς και στην υλοποίηση του αλγορίθμου GRID της Παραγράφου 3.1.

Standard IE

$$z = x + iy$$

z : in

Για κάθε σημείο (x,y) του πλέγματος

$$\text{ΒΗΜΑ 1: } s = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$$

Αν $s > \varepsilon$

Για κάθε $z' \in D^\circ(z, s - \varepsilon)$:

z' : out

$$\Omega = \Omega \setminus D^\circ(z, s - \varepsilon)$$

Τέλος_επανάληψης

Τέλος_αν

Τέλος_επανάληψης

Τέλος.

Large IE

$$z = x + iy$$

z : in

Για κάθε σημείο (x,y) του πλέγματος

$$\text{ΒΗΜΑ 1: } s = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$$

Αν $s > \varepsilon$

Για κάθε $z' \in D^\circ(z, (s - \varepsilon) \text{pss}_A(z))$:

z' : out

$$\Omega = \Omega \setminus D^\circ(z, (s - \varepsilon) \text{pss}_A(z))$$

Εφαρμογή του Βήματος 2α.

Τέλος_επανάληψης

Τέλος_αν

Τέλος_επανάληψης

Εφαρμογή του βήματος 2β.

Τέλος.

Ο γενικός αλγόριθμος IE μπορεί να τροποποιηθεί έτσι ώστε, σε κάθε στήλη του πλέγματος να κινείται αρχικά από πάνω προς τα κάτω κάνοντας αποκλεισμούς σταματώντας μόλις συναντήσει σημείο εντός του ψευδοφάσματος και επαναλαμβάνοντας τη διαδικασία από κάτω προς τα πάνω. Το ίδιο γίνεται και για κάθε γραμμή (από αριστερά προς δεξιά και αντίστροφα). (Koutis & Gallopoulos, 2000)

Τέλος, όσον αφορά την εκμετάλλευση του παραλληλισμού, η διαδικασία παραμένει ακριβώς ίδια με αυτή που αναλύσαμε στο Κεφάλαιο 3 για τον αλγόριθμο GRID. Επισημαίνεται, όμως, ότι εδώ ο παραλληλισμός μπορεί να χρησιμοποιηθεί μόνο για τιμές του ε μικρότερες από την αρχική, όπου η καμπύλη του $\partial\Lambda_\varepsilon$ βρίσκεται στο εσωτερικό της αρχικής καθώς σε αυτή την περίπτωση ξέρουμε ότι δεν θα έχει αποκλειστεί, και άρα διαγραφεί από το πλέγμα, κανένα σημείο της.

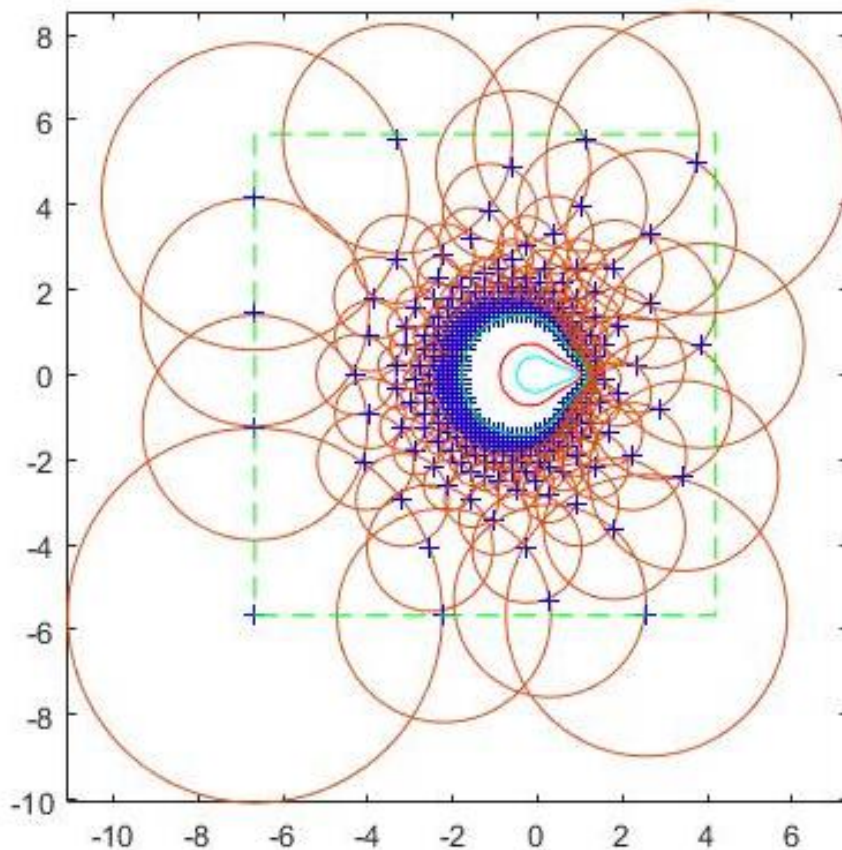
4.2 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση εκτέλεσης

Σκοπός σε αυτό το σημείο είναι να εξετάσουμε κατά πόσο μειώνεται ο αριθμός των SVD παραγοντοποιήσεων που εκτελούνται. Συνεπώς υλοποιώντας τον αλγόριθμο σε MATLAB θα

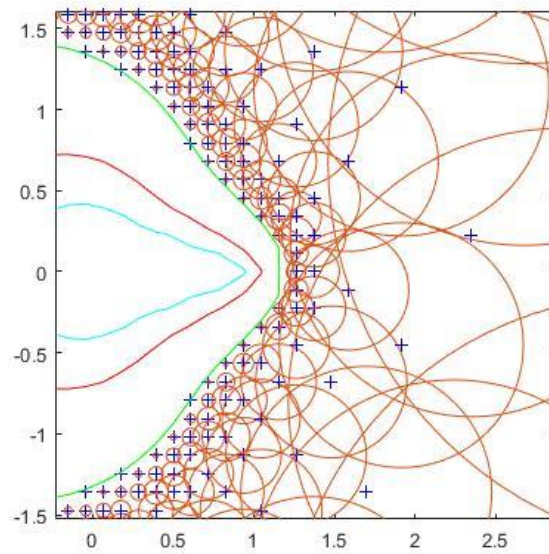
ασχοληθούμε με τον αριθμό των σημείων για τα οποία υπολογίζεται τελικά η $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ σε σχέση με τον συνολικό αριθμό των σημείων του πλέγματος.

Αρχικά μελετάμε το παράδειγμα του πίνακα Kahan μεγέθους 100, για $\varepsilon = 0.1$ και για ένα πλέγμα 100×100 . Συνεπώς, στο συγκεκριμένο πλέγμα ο αλγόριθμος GRID θα υπολόγιζε την $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ για τα 10000 στο σύνολο σημεία του πλέγματος.

Ξεκινάμε με την εκτέλεση του αλγορίθμου Standard IE που βασίζεται στο Θεώρημα 4.2. Σε αυτή την περίπτωση, ο αλγόριθμος τελικά εκτέλεσε SVD παραγοντοποιήσεις σε μόλις 969 σημεία του πλέγματος, διαφορά εξαιρετικά σημαντική μεταξύ αυτού και του GRID ακόμα και για την απλή έκδοση του αλγορίθμου Inclusion-Exclusion. Στο παρακάτω σχήμα απεικονίζονται οι περιοχές αποκλεισμού και τα κέντρα τους, τα σημεία δηλαδή με βάση τα οποία αυτές αποκλείστηκαν, καθώς και μερικά ακόμη επίπεδα του ψευδοφάσματος, τα οποία υπολογίστηκαν πάνω στο ήδη υπάρχον grid με βάση τη διαδικασία παραλληλισμού όπως αυτή περιγράφεται στο τέλος της Παραγράφου 4.1.

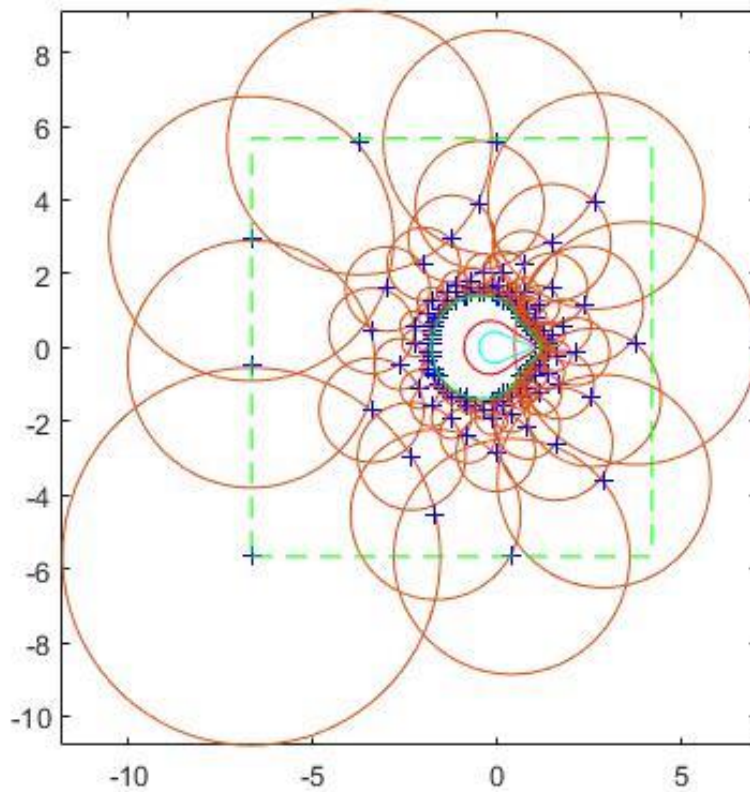


Εικόνα 8: Οι περιοχές αποκλεισμού και το Ω για τον πίνακα Kahan μεγέθους 100, και για $\varepsilon=0.1$ με βάση τον αλγόριθμο Standard IE.



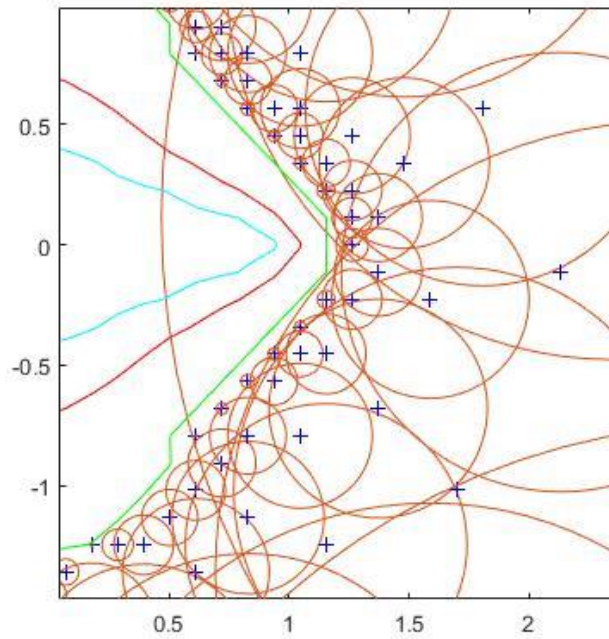
Εικόνα 9: Απεικόνιση της προσέγγισης των περιοχών αποκλεισμού για το ψευδοφάσμα. (Μεγέθυνση Εικόνας 8)

Συνεχίζουμε με την εκτέλεση του Large IE για τον ίδιο πίνακα και τις ίδιες παραμέτρους. Τώρα ο αλγόριθμος εκτέλεσε 646 SVD παραγοντοποιήσεις. Το αποτέλεσμα παρουσιάζεται παρακάτω, όπου είναι φανερή η μείωση των περιοχών αποκλεισμού σε σχέση με την Εικόνα 9.



Εικόνα 10: Οι περιοχές αποκλεισμού και το Ω για τον πίνακα Kahan μεγέθους 100, και για $\varepsilon=0.1$ με βάση τον αλγόριθμο Large IE.

Από την παραπάνω εικόνα φαίνεται και πειραματικά ότι οι περιοχές πιθανού αποκλεισμού που δίνει το Θεώρημα 4.9 είναι κατά το μεγαλύτερο ποσοστό σωστές. Παρακάτω βλέπουμε τις δύο περιοχές στις οποίες αρχικά υπήρξε εσφαλμένος αποκλεισμός, με τα σημεία τα οποία δεν έπρεπε να αποκλειστούν να διορθώνονται και τελικά να σχεδιάζεται η καμπύλη $\partial\Lambda_\varepsilon$ και σε αυτά.

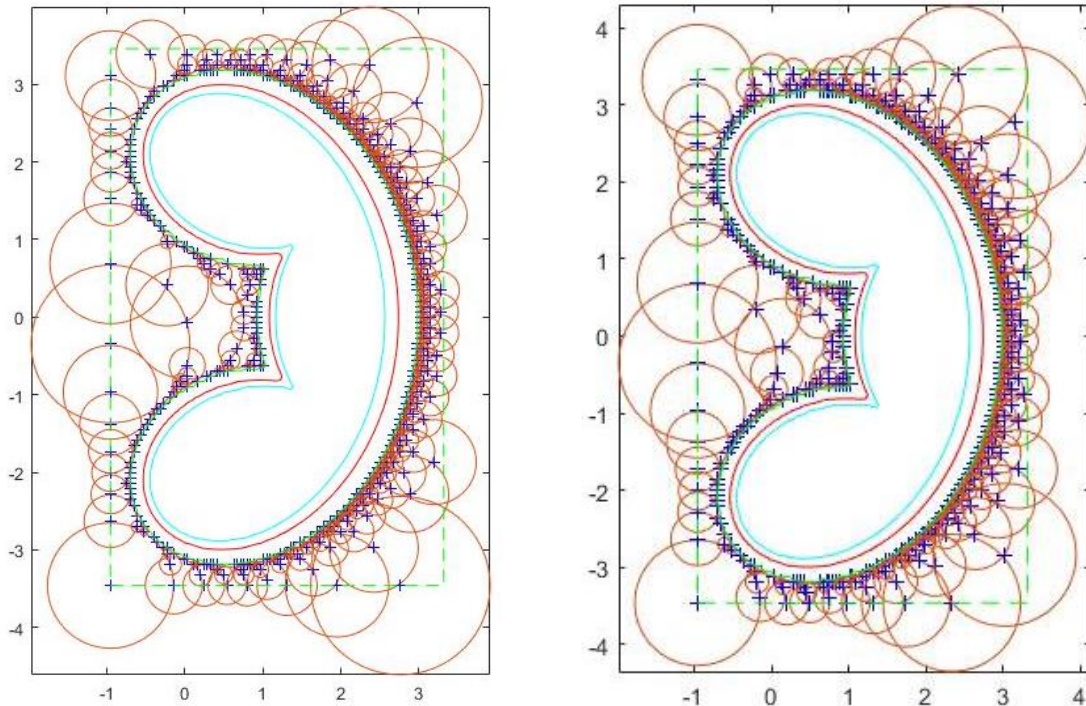


Εικόνα 11: Αρχικά εσφαλμένες περιοχές αποκλεισμού.

Παρακάτω ασχολούμαστε με την περίπτωση του πίνακα Toeplitz επίσης μεγέθους 100, με τις ίδιες παραμέτρους του προηγούμενου παραδείγματος και για τις δύο παραλλαγές του αλγορίθμου. Ο αλγόριθμος εκτέλεσε 6018 και 5946 SVD αντίστοιχα. Παρατηρούμε λοιπόν ότι η μείωση των SVD παραγοντοποιήσεων είναι αρκετά μικρότερη, σε σχέση με την περίπτωση του πίνακα Kahan. Το γεγονός αυτό οφείλεται στην καλή προσαρμογή του χωρίου Ω στο μέγεθος του ψευδοφάσματος, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 5 της Παραγράφου 3.2.

Μια ακόμα σημαντική παρατήρηση είναι η επίσης μικρή διαφορά στη μείωση των σημείων μεταξύ των δύο παραλλαγών του αλγορίθμου. Συνεπώς σε τέτοιες περιπτώσεις πινάκων μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον πιο απλό και σταθερό Standard IE αλγόριθμο.

Τέλος σημειώνεται ότι όπως φαίνεται και παρακάτω, ο αλγόριθμος Large IE δεν υπολόγισε καμία εσφαλμένη περιοχή αποκλεισμού γεγονός που επιβεβαιώνει ακόμα περισσότερο την αρχική υπόθεση ότι οι περιοχές που δίνει το Θεώρημα 4.9 είναι κατά πάσα πιθανότητα σωστές.



Εικόνα 12: Οι περιοχές αποκλεισμού και το Ω για τον πίνακα Toeplitz μεγέθους 100, και για $\epsilon=0.1$ με βάση τους αλγόριθμους Standard IE (αριστερά) και Large IE (δεξιά).

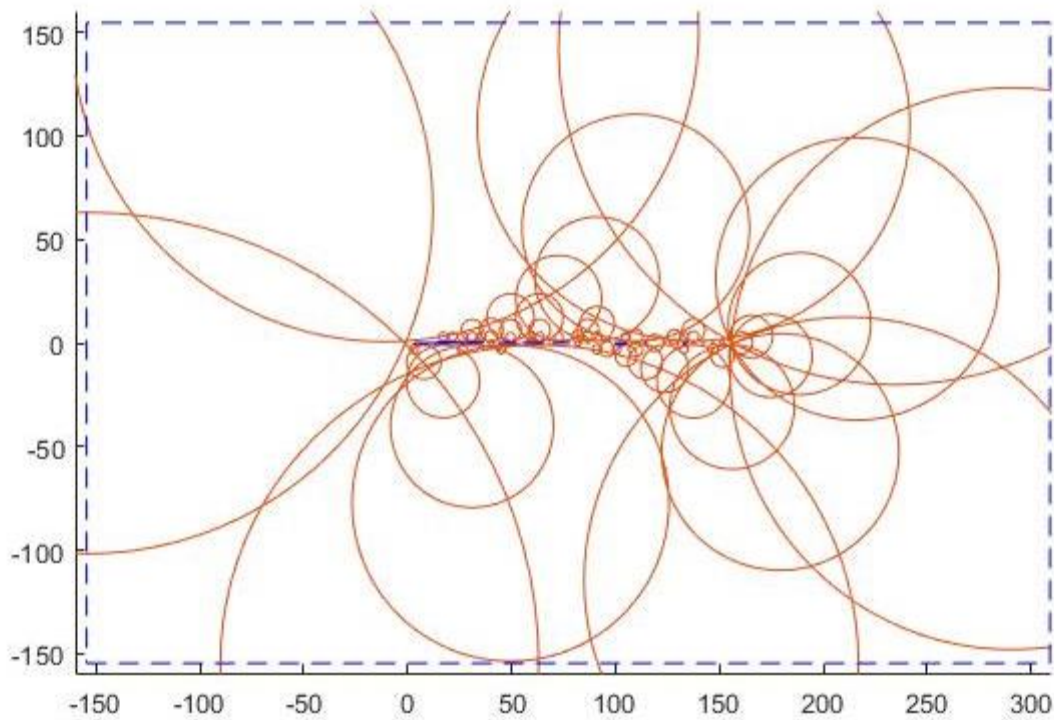
Από την παραπάνω ανάλυση προκύπτει ότι στον αλγόριθμο Inclusion Exclusion, μια υπερεκτίμηση του χωρίου Ω δεν βλάπτει σημαντικά την εκτέλεση του, σε αντίθεση με τον αλγόριθμο GRID και αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι ακόμα κι αν το Ω είναι πολύ μεγαλύτερο από το ψευδοφάσμα, όπως στην περίπτωση του πίνακα Kahan (Εικόνες 8 και 10), οι περιοχές αποκλεισμού είναι αρκετά μεγάλες όσο απομακρυνόμαστε από το ψευδοφάσμα στο μιγαδικό επίπεδο. Στον παρακάτω πίνακα βλέπουμε τον αριθμό των σημείων που υπολόγισαν οι δύο παραλλαγές για τους πίνακες Kahan και Toeplitz μεγέθους 100.

	GRID	Standard IE	Large IE
Kahan	10000	969	646
Toeplitz	10000	6018	5946

Πίνακας 1: Ο αριθμός των σημείων που υπολογίζει η κάθε παραλλαγή του αλγορίθμου Inclusion-Exclusion.

Χαρακτηριστικό παράδειγμα πολύ μεγάλου χωρίου αποτελεί, όπως είδαμε στην Παράγραφο 3.2 ο θετικός και συμμετρικός πίνακας Toeplitz (Εικόνα 7). Εκτελούμε λοιπόν τον αλγόριθμο Inclusion Exclusion και σε αυτόν τον πίνακα μεγέθους 100 για $\epsilon = 1$ και σε πλέγμα 100×100 . Ο αλγόριθμος χρειάστηκε να υπολογίσει μόλις 95 SVD για την εύρεση του ψευδοφάσματος και με τις δύο παραλλαγές του αλγορίθμου. Οι περιοχές αποκλεισμού φαίνονται παρακάτω. Παρατηρούμε πόσο

μεγάλοι είναι οι δίσκοι αποκλεισμού και πόσο γρήγορα τελικά υπολογίζεται το ψευδοφάσμα, με το μέγεθος του Ω να μην επηρεάζει καθόλου τη διαδικασία.



Εικόνα 13: Οι περιοχές αποκλεισμού για το ψευδοφάσμα του θετικού και συμμετρικού πίνακα Toeplitz.

Στο σημείο αυτό ολοκληρώνεται η μελέτη των αλγορίθμων που βασίζονται στην ιδέα του grid. Όπως διαπιστώσαμε, οι αλγόριθμοι αυτοί είναι ιδιαίτερα απλοί και σταθεροί με εγγυημένα σωστά αποτελέσματα. Τα μόνα μειονεκτήματά τους είναι η εξάρτηση από το χωρίο Ω , η οποία όπως είδαμε μπορεί να παρακαμφθεί και η ίσως πολύπλοκη διαδικασία διόρθωσης του αλγορίθμου Large IE.

Στα επόμενα κεφάλαια θα ασχοληθούμε με τη δεύτερη κατηγορία αλγορίθμων, οι οποίοι ακολουθούν την καμπύλη του $\partial\Lambda_\varepsilon$ υπολογίζοντας έτσι τα σημεία της ένα προς ένα.

5. Ο αλγόριθμος Path-Following του Brühl

Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο θα ξεκινήσουμε την μελέτη της δεύτερης κατηγορίας αλγορίθμων για την εύρεση του συνόρου του ψευδοφάσματος, τους αλγορίθμους Path-Following. Η κεντρική ιδέα είναι η εύρεση αρχικά ενός σημείου πάνω το σύνορο και στη συνέχεια ο υπολογισμός του διπλανού του με τη μέθοδο Πρόβλεψης-Διόρθωσης κ.ο.κ., βρίσκοντας τελικά ολόκληρο το σύνορο, έχοντας ακολουθήσει το «μονοπάτι» που ορίζει το πρώτο σημείο. Ο αριθμός των σημείων που θα υπολογιστούν προκαθορίζεται, καθώς ο αλγόριθμος δεν περιέχει κατάλληλη συνθήκη τερματισμού. Σε σχέση με τον αλγόριθμο GRID οι Path-Following αλγόριθμοι πλεονεκτούν στο γεγονός ότι δεν εξαρτώνται από την επιλογή ενός αρχικού χωρίου και επίσης στο ότι ο αριθμός των SVD παραγοντοποιήσεων, που αποτελούν, όπως αναφέραμε, το κύριο χρονικό κόστος μειώνεται σημαντικά. Εντούτοις, παρουσιάζουν κι αυτοί ορισμένα αρκετά σημαντικά μειονεκτήματα, στα οποία θα αναφερθούμε παράλληλα με την ανάλυση του αλγορίθμου.

Η ιδέα του Path-Following αυτή αναπτύχθηκε από τον Martin Brühl, του οποίου τον αλγόριθμο θα αναλύσουμε στο υπόλοιπο του κεφαλαίου.

Στόχος του αλγορίθμου είναι ο υπολογισμός των σημείων και η γραφική απεικόνιση του ψευδοφάσματος ενός πίνακα A , με βάση τη σχέση 2.3(*).

Έστω, λοιπόν, $g(z) = s_{\min}(zI - A)$. Ο αλγόριθμος με βάση την παραπάνω σχέση υπολογίζει την καμπύλη $g(z) = \varepsilon$ του μιγαδικού επιπέδου. Αρχικά αναφέρουμε ένα θεώρημα της Μιγαδικής Ανάλυσης πάνω στα οποία βασίζεται ο υπολογισμός αυτός.

ΘΕΩΡΗΜΑ 5.1. Έστω η συνάρτηση $A(\xi): \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}$, αναλυτική σε μία περιοχή του ξ_0 . Αν s_0 είναι μια απλή μη μηδενική ιδιάζουσα τιμή του $A(\xi_0)$ και $\mathbf{u}_0, \mathbf{v}_0$ τα αντίστοιχα αριστερά και δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα, τότε υπάρχει μια απλή μη μηδενική ιδιάζουσα τιμή $s(\xi)$ του $A(\xi)$ και $\mathbf{u}(\xi), \mathbf{v}(\xi)$ τα αντίστοιχα αριστερά ιδιάζοντα διανύσματα, τέτοια ώστε $s(\xi_0) = s_0, \mathbf{u}(\xi_0) = \mathbf{u}_0$, και $\mathbf{v}(\xi_0) = \mathbf{v}_0$ και οι συναρτήσεις s, \mathbf{u} και \mathbf{v} είναι αναλυτικές σε μια περιοχή του ξ_0 . Επιπλέον, οι μερικές παράγωγοι της $s(\xi)$ δίνονται από τη σχέση

$$\frac{\partial s(\xi_0)}{\partial \xi_j} = \operatorname{Re} \left(\mathbf{u}_0^* \frac{\partial A(\xi_0)}{\partial \xi_j} \mathbf{v}_0 \right), \quad j = 1, \dots, d.$$

(Brühl, 1996)

Στην προκειμένη περίπτωση, είναι $z = x + iy$ και άρα η συνάρτηση $g(z)$ γράφεται ως $g(x, y)$, δηλαδή μας ενδιαφέρει η ειδική περίπτωση του Θεωρήματος 5.1 για συναρτήσεις δύο μεταβλητών που περιγράφεται παρακάτω.

ΠΟΡΙΣΜΑ 5.1 Έστω η συνάρτηση $A(x, y): \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{C}^{n \times n}$, με $A(x, y) = (x + iy)\mathbf{I} - \mathbf{A}$. Τότε από το παραπάνω θεώρημα

$$\frac{\partial s}{\partial x} = \operatorname{Re}(\mathbf{u}^* \mathbf{v}) = \operatorname{Re}(\mathbf{v}^* \mathbf{u}) \quad \text{και} \quad \frac{\partial s}{\partial y} = \operatorname{Re}(i \mathbf{u}^* \mathbf{v}) = \operatorname{Im}(\mathbf{v}^* \mathbf{u}),$$

όπου s είναι μια απλή ιδιάζουσα τιμή του $(x + iy)\mathbf{I} - \mathbf{A}$ και \mathbf{u} και \mathbf{v} τα αντίστοιχα αριστερά και δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα.

Επιπλέον, αν γράψουμε τη συνάρτηση g ως $g(x, y) = s_{\min}((x + iy)\mathbf{I} - \mathbf{A}) = \min_{1 \leq j \leq n} \{s_j((x + iy)\mathbf{I} - \mathbf{A})\}$, τότε το παρακάτω είναι άμεση συνέπεια του Θεωρήματος 2.1.

ΠΟΡΙΣΜΑ 5.2 Έστω $x + iy \in \mathbb{C} / \Lambda(\mathbf{A})$. Τότε η $g(x, y)$ είναι αναλυτική σε μια περιοχή του (x, y) αν η $s_{\min}((x + iy)\mathbf{I} - \mathbf{A})$ είναι μια απλή ιδιάζουσα τιμή. Το ανάδελτα δε της $g(x, y)$ δίνεται από τον τύπο

$$\nabla g(x, y) = \left(\operatorname{Re}(\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}), \operatorname{Im}(\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}) \right) = \mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min} \quad (5.1)$$

όπου \mathbf{u}_{\min} και \mathbf{v}_{\min} τα αριστερά και δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα της $g(x, y) = s_{\min}$. (Bruhl, 1996)

5.1 Ανάλυση και υλοποίηση

Ο αλγόριθμος για τον υπολογισμό της καμπύλης $g(z) = \varepsilon$ αναλύεται σε τρία βήματα. Αρχικά, ξεκινώντας πολύ κοντά σε μια ιδιοτιμή του πίνακα γίνονται μερικές επαναλήψεις της μεθόδου Newton-Raphson πάνω σε μια τυχαία ευθεία για την εύρεση του πρώτου σημείου πάνω στην καμπύλη. Ο λόγος για τον οποίο ξεκινάμε πολύ κοντά στην ιδιοτιμή και όχι από την ίδια την ιδιοτιμή είναι ότι, όπως αναφέραμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, η συμπεριφορά των ιδιοτιμών είναι πολλές φορές απρόβλεπτη. Στη συνέχεια, με τη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης, η οποία αναλύεται παρακάτω, βρίσκουμε και τα υπόλοιπα σημεία της καμπύλης.

5.1.1 Ανάλυση της Newton-Raphson στη συγκεκριμένη περίπτωση

Σκοπός είναι η εύρεση μιας ρίζας της συνάρτησης $f(z) = g(z) - \varepsilon = s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) - \varepsilon$ πάνω στην ευθεία $\{\lambda + \theta\mathbf{d}\}$, με $|\mathbf{d}| = 1$. Συνεπώς, χρησιμοποιείται η μέθοδος Newton-Raphson στην εξίσωση $f(\theta) = g(\lambda + \theta\mathbf{d}) - \varepsilon = 0$.

Χωρίς βλάβη της γενικότητας, θεωρούμε ότι $\theta_0 = 0$, και ότι η g είναι παραγωγίσιμη στο λ , με $\nabla g(\lambda) = \mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min} \neq 0$ (Πόρισμα 5.2). Σύμφωνα με τη μέθοδο Newton-Raphson, το πρώτο σημείο είναι το

$$\theta_1 = \theta_0 - \frac{f(\theta_0)}{f'(\theta_0)} = -\frac{g(\lambda) - \varepsilon}{f'(\theta_0)}$$

Με βάση τις παραπάνω υποθέσεις, από την σχέση (1) προκύπτει ότι $g(\lambda) = s_{\min}$ και $f'(\theta) = \text{Re}(\bar{\mathbf{d}}\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min})$, όπου \mathbf{u}_{\min} και \mathbf{v}_{\min} τα αριστερά και δεξιά ιδιάζοντα διανύσματα του $\lambda\mathbf{I} - \mathbf{A}$, οπότε έχουμε ότι

$$\theta_1 = -\frac{s_{\min} - \varepsilon}{\text{Re}(\bar{\mathbf{d}}\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min})}$$

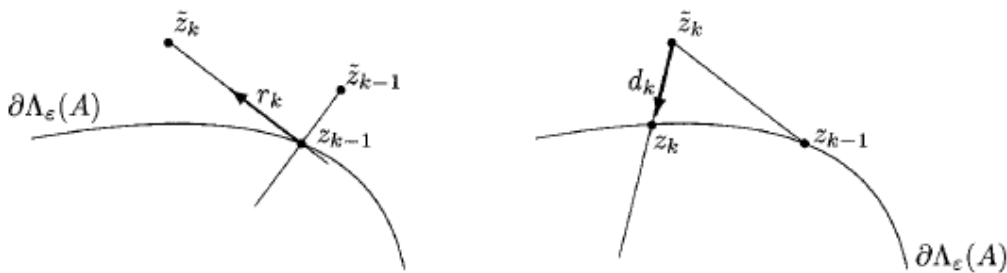
που αντιστοιχεί στο σημείο

$$z_1 = \lambda + \theta_1\mathbf{d} = \lambda - \frac{s_{\min} - \varepsilon}{\text{Re}(\bar{\mathbf{d}}\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min})} \mathbf{d}. \tag{5.2}$$

Τέλος, μια εύκολη επιλογή της κατεύθυνσης \mathbf{d} είναι η $\mathbf{d} = \nabla g(\lambda) = \mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}$ και άρα η σχέση (2) γίνεται

$$z_1 = \lambda - \frac{s_{\min} - \varepsilon}{|\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}|^2} \mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min} = \lambda - \frac{s_{\min} - \varepsilon}{\mathbf{u}_{\min}^* \mathbf{v}_{\min}} \tag{5.3}$$

(Bruhl, 1996)



Εικόνα 14: Τα βήματα 1 και 2 του αλγορίθμου. Η πρόβλεψη και διόρθωση του κάθε σημείου (Bruhl, 1996)

Συνοπτικά, λύνουμε την εξίσωση $f(\lambda_0 + \theta \mathbf{d}_0) = 0$ με τη μέθοδο Newton-Raphson, με, όπου λ_0 μια ιδιοτιμή του πίνακα και \mathbf{d}_0 μια οποιαδήποτε διεύθυνση.

5.1.2 Η μέθοδος Πρόβλεψης-Διόρθωσης

Η συνέχεια του αλγορίθμου αποτελείται από τη μέθοδο «Πρόβλεψης-διόρθωσης», για κάθε ένα από τα σημεία που θέλουμε να υπολογίσουμε. Αναφέρουμε σύντομα πως ο αριθμός αυτός μπορεί να μειωθεί (ή να αυξηθεί) μόνο μετά από πειραματική διαπίστωση.

Συγκεκριμένα, δεδομένου ενός σημείου z_{k-1} πάνω στο $\partial\Lambda_\varepsilon$, γίνεται η πρόβλεψη \tilde{z}_k του επόμενου σημείου σε διεύθυνση εφαπτόμενη στην μέχρι τώρα καμπύλη, κάθετη δηλαδή στο $\nabla g(z_{k-1})$ και για συγκεκριμένο βήμα πρόβλεψης τ_k και τέλος, με μια μόνο επανάληψη Newton-Raphson για την εξίσωση $f(\tilde{z}_k + \theta \mathbf{d}_k) = 0$, υπολογίζεται το σημείο z_k με χρήση της σχέσης (5.3).

Συγκεντρωτικά τα βήματα του αλγορίθμου είναι τα εξής.

ΒΗΜΑ 0. Βρίσκουμε το πρώτο σημείο, z_1 του $\partial\Lambda_\varepsilon$ με χρήση της μεθόδου Newton-Raphson.

Για $k = 2, 3, \dots$ τα σημεία του συνόρου που θέλουμε ο αλγόριθμος να υπολογίσει

ΒΗΜΑ 1. Θέτουμε μια κατεύθυνση \mathbf{r}_k , με $|\mathbf{r}_k| = 1$ και ένα βήμα τ_k και υπολογίζουμε την πρόβλεψη του σημείου, ως $\tilde{z}_k = z_{k-1} + \tau_k \mathbf{r}_k$

ΒΗΜΑ 2. Διόρθωση του σημείου \tilde{z}_k για τον υπολογισμό του τελικού z_k πάνω στο σύνορο, με μια επανάληψη της μεθόδου Newton-Raphson, με βάση τη σχέση (5.3).

Παρατηρούμε λοιπόν, ότι με βάση την παραπάνω ανάλυση, θα πρέπει γίνονται δύο SVD παραγοντοποιήσεις για την εύρεση κάθε σημείου, μια για την πρόβλεψη, για την εύρεση της κατεύθυνσης \mathbf{r}_k , και μια για την επανάληψη της Newton-Raphson στη διόρθωση, γεγονός που αυξάνει σημαντικά τη χρονική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου.

Για την αποφυγή της αύξησης αυτής, ο Brühl έκανε την εξής παραλλαγή. Δεν υπολογίζεται το $\nabla g(\tilde{z}_k)$ για την Newton-Raphson της διόρθωσης, αλλά χρησιμοποιείται το ήδη υπολογισμένο $\nabla g(z_{k-1})$. Εξάλλου, τα δύο αυτά ανάδελα έχουν σχεδόν παράλληλες διευθύνσεις για κατάλληλα μικρή επιλογή του βήματος της πρόβλεψης. Συνεπώς τελικά γίνεται μια μόνο SVD για την εύρεση κάθε σημείου του $\partial\Lambda_\varepsilon$.

Στο σημείο αυτό, έχοντας ήδη μειώσει τον αριθμό των SVD στο μισό, θα αναφερθούμε σύντομα στον ρόλο του βήματος της πρόβλεψης τ στο χρονικό κόστος αλλά και την ακρίβεια του αλγορίθμου. Προφανώς, ένα μικρό βήμα καθιστά τον αλγόριθμο πιο ακριβή αλλά ταυτόχρονα αυξάνει τον αριθμό των SVD και άρα και το κόστος του αλγορίθμου. Μια λύση θα ήταν η προσαρμογή του βήματος ανά επανάληψη, έτσι ώστε αν η καμπυλότητα του συνόρου του ψευδοφάσματος σε μια περιοχή είναι μικρή, να επιλέγεται μεγαλύτερο βήμα, και αντίστοιχα μικρότερο σε μεγάλη καμπυλότητα. Δυστυχώς όμως, δεν μπορούμε να συμπεριλάβουμε κάτι τέτοιο στον αλγόριθμο, διότι προφανώς η βέλτιστη επιλογή του βήματος εξαρτάται από τα γεωμετρικά στοιχεία της καμπύλης τα οποία δεν είναι εξ' αρχής γνωστά.

Τέλος, ένα σημαντικό μειονέκτημα του Path-Following είναι ότι, επειδή ακριβώς ξεκινάει από μια συγκεκριμένη ιδιοτιμή, για μικρές τιμές του ε , όπου το ψευδοφάσμα είναι μη συνεκτικό, ο αλγόριθμος θα υπολογίσει μόνο μια συνεκτική συνιστώσα, αυτόν που αναπτύσσεται γύρω από την ιδιοτιμή έναρξης.

Η παραπάνω θεωρητική ανάλυση του αλγορίθμου συνοψίζεται στον παρακάτω ψευδοκώδικα.

ΕΙΣΟΔΟΣ:

$$\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}, \varepsilon > 0$$

K : ο αριθμός των σημείων του συνόρου που θα υπολογιστούν

$$\mathbf{d}_0: \text{η διεύθυνση για το πρώτο σημείο, συνήθως } \mathbf{d}_0 = 1 + i$$

tol : η ακρίβεια για το πρώτο σημείο, συνήθως 10^{-6}

τ : το βήμα για την πρόβλεψη, συνήθως 10^{-3}

ΒΗΜΑ 0: Υπολογισμός του πρώτου σημείου

$$z_1^{new} = \lambda_0 + \frac{\varepsilon}{2} \mathbf{d}_0, \text{ όπου } \lambda_0 \text{ για τυχαία ιδιοτιμή του πίνακα.}$$

$$\text{Όσο } |z_1^{new} - z_1^{old}| > tol$$

$$z_1^{old} = z_1^{new}$$

Υπολογισμός της τριπλέτας $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ με SVD για τον πίνακα $z_1^{old} \mathbf{I} - \mathbf{A}$

Υπολογισμός του z_1^{new} , σύμφωνα με την σχέση (5.2)

Τέλος_επανάληψης

$$z_1 = z_1^{new}$$

Για $k = 2, 3, \dots, K$

ΒΗΜΑ 1: Πρόβλεψη

Υπολογισμός της τριπλέτας $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ με SVD για τον πίνακα $z_{k-1}\mathbf{I} - \mathbf{A}$

$$\mathbf{r}_k = i \frac{\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}}{|\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}|}$$

$$\tilde{z}_k = z_{k-1} + \tau \mathbf{r}_k$$

ΒΗΜΑ 2: Διόρθωση

Υπολογισμός του z_k , σύμφωνα με την σχέση (5.3), αντικαθιστώντας όπου λ το \tilde{z}_k και κάνοντας χρήση της τριπλέτας για το z_{k-1} .

Τέλος_επανάληψης**Τέλος.****5.2 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση εκτέλεσης**

Ο αλγόριθμος Path-Following υλοποιήθηκε επίσης στα πλαίσια της συγκεκριμένης εργασίας σε MATLAB και στη συνέχεια παρουσιάζονται μερικές εκτελέσεις του, έτσι ώστε να διαπιστωθεί ο αριθμός των απαιτούμενων επαναλήψεων της μεθόδου Newton-Raphson για την εύρεση του πρώτου σημείου, καθώς και τον συνολικό χρόνο εκτέλεσης του αλγορίθμου για την εύρεση όλου του συνόρου με τη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης.

Παρουσιάζεται πάλι ένα απλό παράδειγμα ενός τυχαίου πίνακα $\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{5 \times 5}$ για την διεξαγωγή ορισμένων απλών, αρχικά, παρατηρήσεων.

A =

0.0760	0.4173	0.4893	0.7803	0.1320
0.2399	0.0497	0.3377	0.3897	0.9421
0.1233	0.9027	0.9001	0.2417	0.9561
0.1839	0.9448	0.3692	0.4039	0.5752
0.2400	0.4909	0.1112	0.0965	0.0598

Οι ιδιοτιμές του A είναι οι:

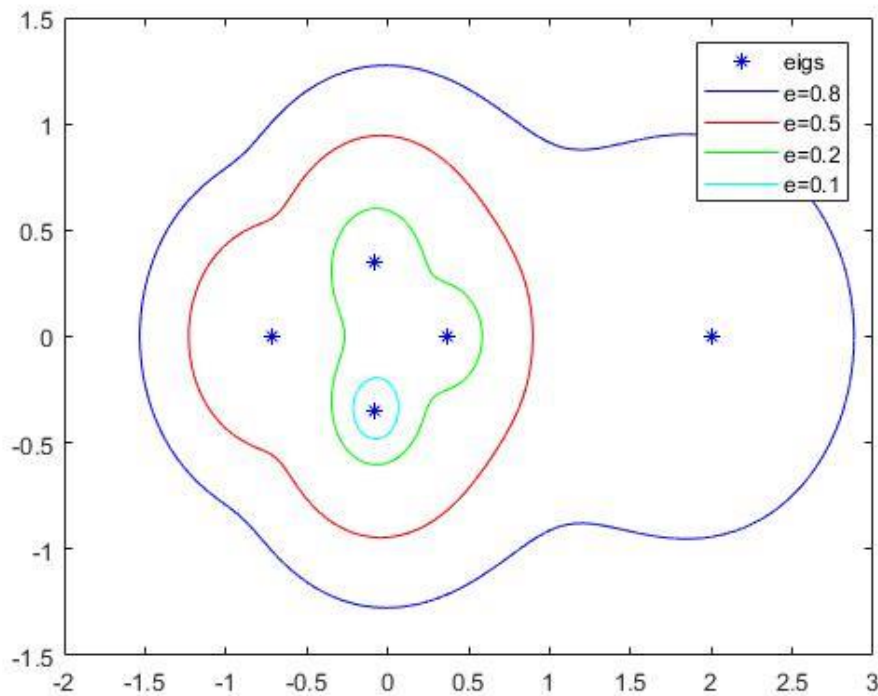
eigs =

```

-0.0783 - 0.3507i
-0.0783 + 0.3507i
 0.3639 + 0.0000i
-0.7208 + 0.0000i
 2.0028 + 0.0000i

```


Τρέξαμε τον αλγόριθμο αρχικά για $\varepsilon = 0.8$, $\varepsilon=0.5$, $\varepsilon=0.2$, $\varepsilon=0.1$.



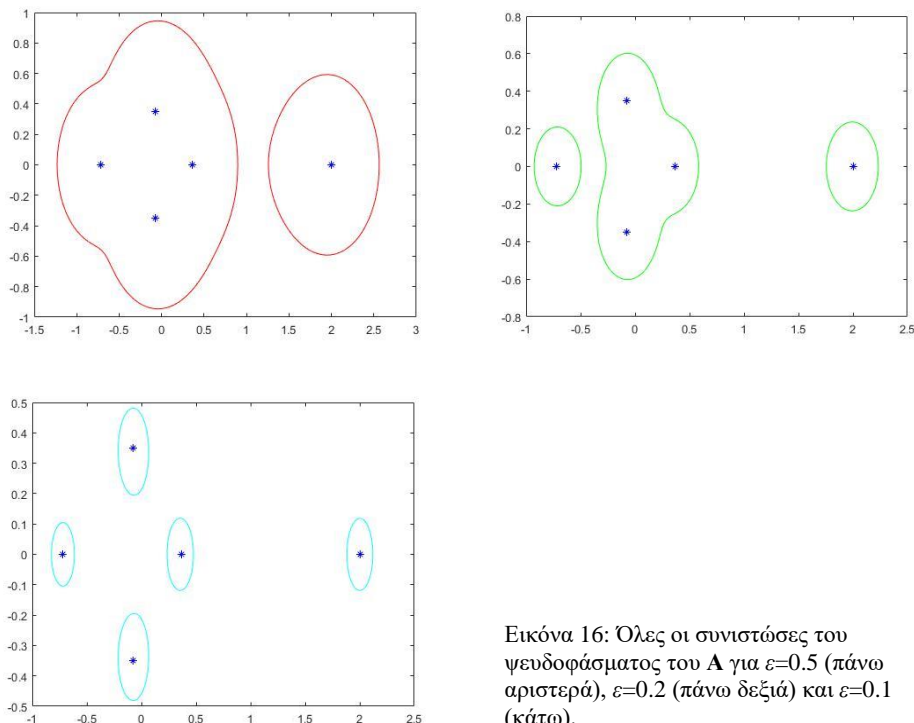
Εικόνα 15: Οι συνεκτικές συνιστώσες του ψευδοφάσματος του πίνακα A , ξεκινώντας από τη μικρότερη ιδιοτιμή, $\lambda=-0.1985$.

Ο αλγόριθμος υπολόγισε το $\partial\Lambda_\varepsilon$ για $\varepsilon = 0.8$ σε περίπου 0.26 sec και για όλες τις υπόλοιπες τιμές του ε σε περίπου 0.17 sec, τιμές μικρή αλλά και αναμενόμενη λόγω του μικρού μεγέθους του πίνακα. Φαίνεται βέβαια ότι για μεγαλύτερες τιμές του ε ο αλγόριθμος χρειάζεται περισσότερο χρόνο, καθώς το μήκος του $\partial\Lambda_\varepsilon$ είναι μεγαλύτερο και άρα πρέπει να υπολογιστούν περισσότερα σημεία καμπύλης. Ο αριθμός επαναλήψεων που χρειάστηκαν για να συγκλίνει η Newton-Raphson με έναρξη τη συγκεκριμένη ιδιοτιμή ήταν 6, 5, 6 και 4 για κάθε μία από τις τιμές του ε . Παρατηρούμε δηλαδή ότι ο αριθμός των επαναλήψεων εξαρτάται από το ε αλλά και την ιδιοτιμή έναρξης και προφανώς την κατεύθυνση στην οποία επιλέξαμε να κινηθούμε, εδώ η κατεύθυνση της διαγωνίου $1+i$. Αν εξετάσουμε δηλαδή τις περιπτώσεις $\varepsilon = 0.8$ και $\varepsilon = 0.2$ για τις οποίες χρειάστηκαν οι περισσότερες επαναλήψεις, βλέπουμε από την Εικόνα 15 ότι κατά την κατακόρυφο, το $\partial\Lambda_\varepsilon$ είναι πολύ πιο κοντά στην ιδιοτιμή έναρξης από ότι κατά τη διαγώνιο και συνεπώς η Newton-Raphson θα συνέκλινε πιθανώς πιο γρήγορα. Η διαπίστωση αυτή δεν μπορεί να γίνει παρά μόνο πειραματικά, αφού δηλαδή εκτελεστεί ο αλγόριθμος και δούμε την μορφή του ψευδοφάσματος στην εκάστοτε περίπτωση. Ο αριθμός των επαναλήψεων για κάθε τιμή του ε και ξεκινώντας από κάθε μια ιδιοτιμή παρατίθεται στον Πίνακα 1.

Ακόμα μια σημαντική παρατήρηση από την παραπάνω γραφική παράσταση είναι η έλλειψη ορισμένων συνιστωσών του ψευδοφάσματος, για τιμές του ε στις οποίες αυτό δεν είναι συνεκτικό. Όπως αναφέρθηκε και στην προηγούμενη παράγραφο, αυτό είναι ένα βασικό «μειονέκτημα» του αλγορίθμου, καθώς ο κώδικας λαμβάνει υπ' όψιν του μια τυχαία ιδιοτιμή του πίνακα, στην υλοποίηση μας τη μικρότερη, και ξεκινά από αυτήν. Η λύση σε αυτό το πρόβλημα είναι η εκ νέου εκτέλεση του αλγορίθμου, ο οποίος θα ξεκινά από τις υπόλοιπες ιδιοτιμές για τις οποίες δεν έχει σχηματιστεί συνιστώσα του ψευδοφάσματος.

Είναι προφανές ότι η επιλογή της εκάστοτε ιδιοτιμής σε αυτή την περίπτωση είναι καθαρά πειραματική, διότι δεν υπάρχει σε αυτό το στάδιο τρόπος ο αλγόριθμος να αποφαινεται αν το ψευδοφάσμα είναι συνεκτικό και αν όχι, ποιες είναι οι ιδιοτιμές για τις οποίες πρέπει να εκτελεστεί εκ νέου ο αλγόριθμος.

Σημειώνεται ότι σε μικρούς πίνακες όπως ο πίνακας A του παραδείγματος, κάτι τέτοιο είναι εύκολο. Με βάση την Εικόνα 15 παρατηρούμε πως για $\varepsilon = 0.5$ η μόνη ιδιοτιμή για την οποία πρέπει να εκτελεστεί ξανά ο αλγόριθμος είναι η $\lambda_5 = 2.0028$, ενώ για $\varepsilon = 0.2$ είναι και η λ_5 αλλά και η $\lambda_4 = 0.7208$ και τέλος για $\varepsilon = 0.1$ είναι όλες οι ιδιοτιμές εκτός από την $\lambda_1 = -0.0783 - 0.3507i$.



Εικόνα 16: Όλες οι συνιστώσες του ψευδοφάσματος του A για $\varepsilon=0.5$ (πάνω αριστερά), $\varepsilon=0.2$ (πάνω δεξιά) και $\varepsilon=0.1$ (κάτω).

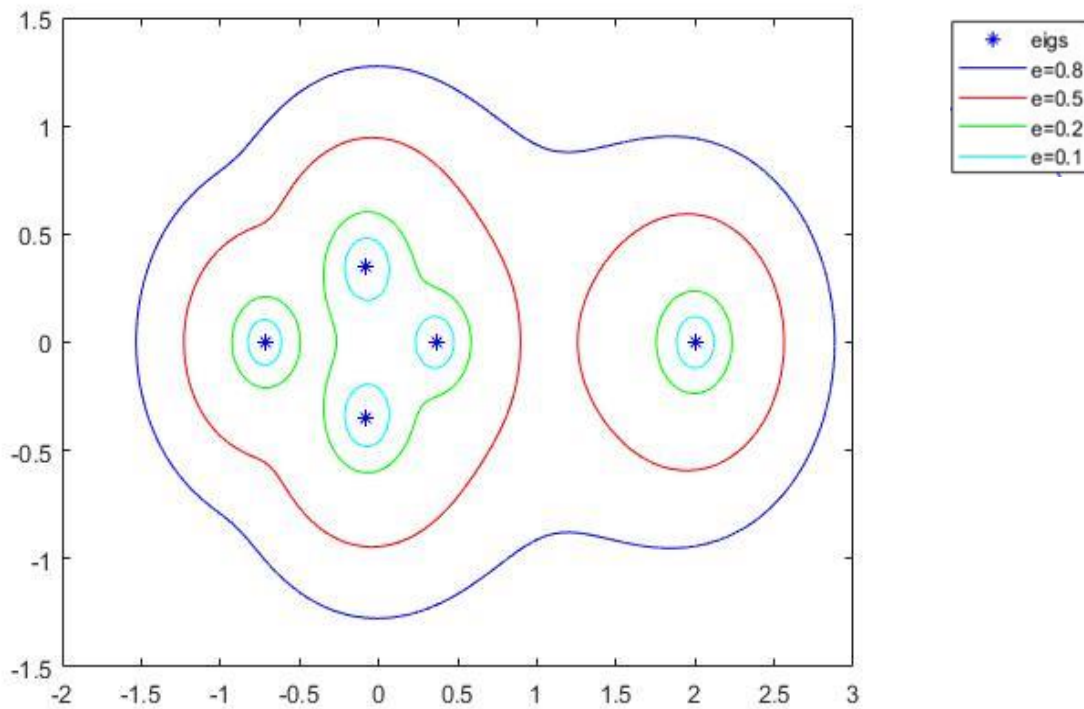
Σε όλες τις παραπάνω περιπτώσεις, ο συνολικός χρόνος εκτέλεσης ήταν περίπου ίδιος με αυτόν της πρώτης εκτέλεσης για την εκάστοτε τιμή του ε .

Στον παρακάτω πίνακα βλέπουμε τον αριθμό επαναλήψεων που χρειάστηκαν για να συγκλίνει η Newton-Raphson για τον υπολογισμό καθεμιάς από τις καμπύλες της Εικόνας 17.

		Τιμή του ϵ			
		0.8	0.5	0.2	0.1
Ιδιοτιμή έναρξης	$-0.0783-0.3507i$	6	5	6	4
	$-0.0783 + 0.3507i$	-	-	-	3
	0.3639	-	-	-	3
	-0.7208	-	-	4	3
	2.0028	-	3	3	3

Πίνακας 2: Ο αριθμός επαναλήψεων της Newton-Raphson σε κάθε περίπτωση.

Τέλος στην παρακάτω εικόνα παρουσιάζονται συνολικά όλες οι συνεκτικές συνιστώσες του Λ_ϵ όπως προέκυψαν από την παραπάνω διαδικασία.

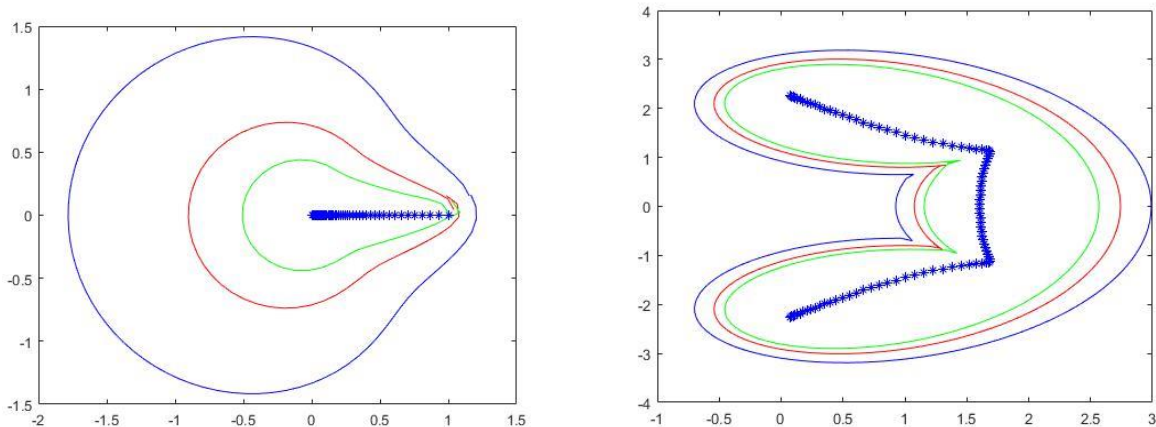


Εικόνα 17: Ολόκληρο το ψευδοφάσμα του A .

Τελειώνοντας την ανάλυση του αλγορίθμου, μελετάμε πάλι τις περιπτώσεις των πινάκων Kahan και Toeplitz για την καταγραφή του χρόνου του αλγορίθμου.

Για τον πίνακα Kahan ο χρόνος εκτέλεσης για όλες τις τιμές του ϵ που φαίνονται στην Εικόνα 18 ήταν περίπου 0.1 sec, όπου παρατηρείται μια μικρή αύξηση του χρόνου από τον απλούστερο

πίνακα του προηγούμενου παραδείγματος, και οι επαναλήψεις της Newton-Raphson ήταν κατά σειρά 5, 6 και 4 και ο αριθμός σημείων που χρειάστηκε να υπολογιστούν ήταν 90, 55 και 40. Στην Εικόνα 18 παρατηρούμε μια μικρή απόκλιση της καμπύλης στην περιοχή όπου υπάρχει απότομη αλλαγή κλίσης. Αυτό στην προκειμένη περίπτωση διορθώνεται από την μείωση του βήματος πρόβλεψης. Παρ’ όλα αυτά βλέπουμε ότι το αποτέλεσμα είναι ικανοποιητικό και αποφεύγουμε την αύξηση του βήματος για να μην αυξηθεί ο χρόνος εκτέλεσης.



Εικόνα 18: Μια συνεκτική συνιστώσα του ψευδοφάσματος των πινάκων Kahan (αριστερά) και Toeplitz (δεξιά) μεγέθους 100 για $\epsilon = 0.1, 0.01, 0.001$.

	Επαναλήψεις Newton-Raphson	Συνολικός αριθμός σημείων
0.1	5	90
0.01	6	55
0.001	4	40

Πίνακας 3: Ο αριθμός επαναλήψεων και σημείων για την εύρεση του Λ_ϵ του πίνακα Kahan.

Για τον πίνακα Toeplitz ο χρόνος εκτέλεσης ήταν περίπου 0.3 sec και ο αριθμός επαναλήψεων της Newton-Raphson κατά σειρά ήταν 7, 9 και 11. Ο αριθμός των σημείων που χρειάστηκαν για τον υπολογισμό ολόκληρης της καμπύλης κατά σειρά 200, 190 και 190.

	Επαναλήψεις Newton-Raphson	Συνολικός αριθμός σημείων
0.1	7	200
0.01	9	190
0.001	11	190

Πίνακας 4: Ο αριθμός επαναλήψεων και σημείων για την εύρεση του Λ_ϵ του πίνακα Toeplitz.

Εδώ λοιπόν, είναι ευκρινέστερη η σχέση του αριθμού επαναλήψεων με την ιδιοτιμή έναρξης και την απόσταση του $\partial\Lambda_\varepsilon$, πάντοτε κατά τη διαγώνιο, και όχι κατ' ανάγκη με την τιμή του ε . Εντούτοις είναι προφανές ότι για πολύ μικρές τιμές του ε , όπου το ψευδοφάσμα είναι, όπως είδαμε και στα παραδείγματα αρκετά κοντά στην ιδιοτιμή, περίπτωση στην οποία συνήθως θα έχει τόσες συνεκτικές συνιστώσες όσες και οι ιδιοτιμές, ο αριθμός επαναλήψεων αναμένεται να είναι αρκετά μικρός ανεξαρτήτου κατεύθυνσης.

Επίσης, παρατηρούμε ότι ο αριθμός των απαιτούμενων σημείων φαίνεται να εξαρτάται κυρίως από το σχήμα του $\partial\Lambda_\varepsilon$ και την τιμή του ε και όχι τόσο από το μέγεθος του πίνακα.

Σε παραδείγματα τέτοιων πινάκων είναι φανερό ότι ο υπολογισμός μόνο μιας συνεκτικής συνιστώσας του Λ_ε σε περίπτωση μη συνεκτικότητας γίνεται μεγαλύτερο –και άλυτο σ' αυτό το σημείο – πρόβλημα όσο το μέγεθος του πίνακα αυξάνεται. Παρατηρείται, εντούτοις σημαντική διαφορά του χρόνου εκτέλεσης του αλγορίθμου σε σχέση με τον απλό αλγόριθμο GRID, ο οποίος χρειάστηκε το δεκαπλάσιο χρόνο για τον υπολογισμό του ψευδοφάσματος των ίδιων πινάκων.

Τέλος, αναφέρουμε σύντομα ότι ένα ακόμη μειονέκτημα του συγκεκριμένου αλγορίθμου είναι πως εάν η μορφή του Λ_ε στο μιγαδικό επίπεδο είναι τέτοια ώστε κάποια από τα τμήματα του $\partial\Lambda_\varepsilon$ είναι πολύ κοντά το ένα με το άλλο, χωρίς να είναι διαδοχικά τμήματά του, ο αλγόριθμος ενδέχεται να «πηδάει» από το ένα στο άλλο. Η λύση στο πρόβλημα αυτό είναι η χρήση ενός πολύ μικρού βήματος γεγονός που όμως αυξάνει σημαντικά τον χρόνο εκτέλεσης, αφού αυξάνεται ο αριθμός των σημείων και άρα των SVD παραγοντοποιήσεων. Η περίπτωση αυτή περιγράφεται αναλυτικότερα στην Παράγραφο 6.3.

6. Ο αλγόριθμος “Cobra” – Επέκταση του αλγορίθμου Path-Following

Ο αλγόριθμος “Cobra” αποτελεί μια βελτίωση αλγορίθμου του Brühl εισάγοντας μια μέθοδο παράλληλου υπολογισμού σημείων, όπως αναλύεται στις επόμενες παραγράφους και αναπτύχθηκε από τους Κωνσταντίνο Μπέκα και Ευστράτιο Γαλλόπουλο. Η βασική διαφορά του με τον αλγόριθμο του Brühl έγκειται στο γεγονός ότι δοθέντων δύο ήδη γνωστών σημείων του $\partial\Lambda_\varepsilon$, ο αλγόριθμος υπολογίζει προσεγγίσεις σημείων της στην ευθεία που ορίζουν αυτά τα δύο σημεία και στη συνέχεια τα διορθώνει, όπως ακριβώς γίνεται η διόρθωση των σημείων στον αλγόριθμο του Brühl, αλλά με τη χρήση παράλληλων επεξεργασιών, μειώνοντας έτσι το χρόνο που απαιτείται για να υπολογιστεί όλο το σύνορο. Επιπλέον, εκτός από την μείωση του χρόνου εκτέλεσης με την εισαγωγή του παραλληλισμού, ο αλγόριθμος Cobra αντιμετωπίζει την περίπτωση αποτυχίας του αλγορίθμου του Brühl σε περιοχές όπου η γεωμετρία του $\partial\Lambda_\varepsilon$ είναι περίεργη. Θα δούμε στη συνέχεια ότι αν και οι δύο αυτοί αλγόριθμοι βασίζονται στην ίδια ιδέα, ο αλγόριθμος Cobra δίνει επιθυμητά αποτελέσματα σε περιπτώσεις που ο αλγόριθμος Path-Following αποτυχαίνει λόγω είτε απότομης αλλαγής της κλίσης του $\partial\Lambda_\varepsilon$ είτε μικρής απόστασης μεταξύ κάποιων μη διαδοχικών τμημάτων της καμπύλης.

6.1 Ανάλυση βημάτων – Υλοποίηση αλγορίθμου

Η εύρεση του πρώτου σημείου πάνω στο σύνολο γίνεται όπως ακριβώς και στον αλγόριθμο του Brühl, με χρήση της μεθόδου Newton-Raphson. Στη συνέχεια, δεδομένου έχει βρεθεί το στοιχείο, το οποίο θα ονομάζουμε «οδηγό στοιχείο» (pivot) ο αλγόριθμος αποτελείται από τρεις φάσεις. Αρχικά, υπολογίζεται το επόμενο στοιχείο z_k^{sup} με τη μέθοδο πρόβλεψης-διόρθωσης του Brühl. Η δεύτερη φάση, αποτελείται από δύο βήματα. Πρώτον βρίσκουμε m προσεγγίσεις $\zeta_j, j=1, \dots, m$ για σημεία της καμπύλης, πάνω στην ευθεία που ορίζουν τα σημεία z_{k-1}^{piv} και z_k^{sup} . Το δεύτερο βήμα αποτελείται από τον παραλληλισμό που καθιστά αυτό τον αλγόριθμο μια «βελτίωση» του αλγορίθμου Path-Following του Brühl. Συγκεκριμένα διορθώνουμε αυτά τα σημεία με μια επανάληψη της μεθόδου Newton-Raphson και βρίσκουμε τα $z_k^j, j=1, \dots, m$. Οι διορθώσεις αυτές είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους και μπορούν να γίνουν ταυτόχρονα. Τέλος, στην τρίτη φάση, χρησιμοποιούνται μέθοδοι επιλογής για την επιλογή του καινούριου στοιχείου pivot στις οποίες δεν θα εμβαθύνουμε περαιτέρω, καθώς είθισται να επιλέγεται το τελευταίο σημείο που υπολογίστηκε από την παραπάνω διαδικασία, δηλαδή το z_m . (Bekas & Gallopoulos, 2001)

Τα βήματα συνοψίζονται ως εξής.

ΒΗΜΑ 0. Βρίσκουμε το πρώτο σημείο, z_1 του συνόρου του ψευδοφάσματος με χρήση της μεθόδου Newton-Raphson.

Για $k = 2, 3, \dots$ τα σημεία του συνόρου που θέλουμε ο αλγόριθμος να υπολογίσει

ΒΗΜΑ 1. Εύρεση του επόμενου στοιχείου με τον αλγόριθμο του Brühl.

ΒΗΜΑ 2. Εύρεση m προσεγγίσεων σημείων της καμπύλης, $\zeta_j, j = 1, \dots, m$ πάνω στην ευθεία που ορίζουν τα δύο τελευταία σημεία που έχουν βρεθεί.

ΒΗΜΑ 3. Διόρθωση των προσεγγίσεων με μια επανάληψη της Newton-Raphson.

ΒΗΜΑ 4. Επιλογή επόμενου στοιχείου pivot.

6.1.1 Η διαδικασία εύρεσης των ζ_j προσεγγίσεων και η διόρθωσή τους

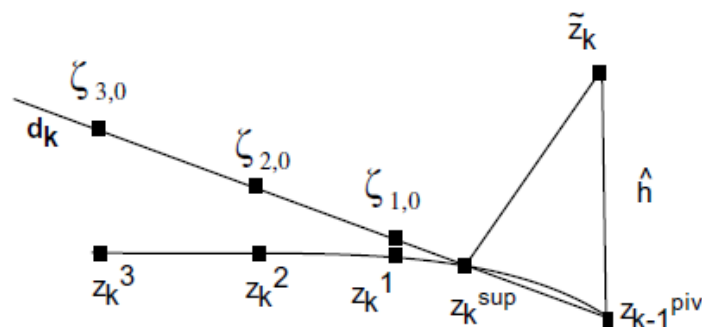
Αρχικά βρίσκουμε το διάνυσμα κατεύθυνσης της ευθείας που ορίζουν τα σημεία z_{k-1}^{piv} και z_k^{sup} , ως

$$\mathbf{d}_k = \frac{z_k^{sup} - z_k^{piv}}{|z_k^{sup} - z_k^{piv}|}.$$

Στην περιοχή του z_{k-1}^{piv} , το σύνορο του ψευδοφάσματος προσεγγίζεται από το ευθύγραμμο τμήμα με διεύθυνση \mathbf{d}_k και ένα προκαθορισμένο μήκος “λαιμού κόμπρας” H . Τα σημεία ζ_j είναι ισαπέχοντα σημεία πάνω στο ευθύγραμμο τμήμα και δίνονται από τον τύπο

$$\zeta_j = z_{k-1}^{piv} + jh, \quad \text{όπου } h = H / m.$$

Τέλος, η διόρθωση των σημείων γίνεται όπως ακριβώς και στον αλγόριθμο Brühl, χρησιμοποιώντας την σχέση (5.3). Στη υλοποίηση του αλγορίθμου το επόμενο στοιχείο pivot επιλέγεται να είναι το z_k^m . (Bekas & Galloroulos, 2001)



Εικόνα 19. Τα βήματα 2 και 3 του αλγορίθμου. Η πρόβλεψη και η διόρθωση των σημείων ζ_j .

Είναι σημαντικό να αναφέρουμε ότι τα σημεία ζ_j θα πρέπει να είναι αρκετά κοντά στο σημείο ρινοί, για να μην ξεφύγει ο αλγόριθμος από την καμπύλη και οδηγηθούμε σε λάθος αποτελέσματα. Όπως αναφέραμε και στο προηγούμενο κεφάλαιο, δεν μπορούμε να γνωρίζουμε αρχικά το βήμα της πρόβλεψης, διότι το βέλτιστο εξαρτάται από τη γεωμετρία της καμπύλης. Οπότε, στην υλοποίηση του αλγορίθμου Cobra, το μήκος του ευθυγράμμου τμήματος H λειτουργεί σαν το βήμα της πρόβλεψης τ του Brühl και επιλέγεται να είναι ένα μικρό πολλαπλάσιό του. (Bekas & Gallopoulos, 2001)

Η παραπάνω θεωρητική ανάλυση του αλγορίθμου Cobra συνοψίζεται στον παρακάτω ψευδοκώδικα.

ΕΙΣΟΔΟΣ:

$$\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}, \varepsilon > 0$$

K : ο αριθμός των σημείων που θέλουμε να υπολογίσουμε

\mathbf{d}_0 : η κατεύθυνση για το πρώτο σημείο, συνήθως $\mathbf{d}_0 = i$

$$\lambda_0 = \lambda' + \frac{\varepsilon}{2} \mathbf{d}_0, \text{ όπως αναλύεται παραπάνω}$$

tol : η ακρίβεια για το πρώτο σημείο, συνήθως 10^{-6}

τ : το βήμα για την πρόβλεψη του z_k^{sup} , συνήθως 10^{-3}

H : το μήκος του ευθυγράμμου τμήματος

m : το πλήθος των ζ_j σημείων που θα υπολογίσουμε

ΒΗΜΑ 0: Υπολογισμός του πρώτου σημείου, όπως και στον αλγόριθμο του Brühl.

Για $k = 2, 3, \dots, K$

$$\text{Θέτουμε } z_{k-1}^m = z_{k-1}^{piv}$$

ΒΗΜΑ 1:

Πρόβλεψη Brühl

$$\mathbf{r}_k = i \frac{\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}}{\|\mathbf{v}_{\min}^* \mathbf{u}_{\min}\|}$$

$$\tilde{z}_k^{sup} = z_{k-1}^{piv} + \tau \mathbf{r}_k$$

Διόρθωση Brühl

Υπολογισμός της τριπλέτας $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ με SVD για τον πίνακα $\tilde{z}_k^{sup} \mathbf{I} - \mathbf{A}$

Υπολογισμός του z_k^{sup} , σύμφωνα με την σχέση (5.3), αντικαθιστώντας όπου λ το \tilde{z}_k^{sup} .

ΒΗΜΑ 2:

Ορισμός του βήματος ως $h = H / m$ και της κατεύθυνσης ως $\mathbf{d}_k = \frac{z_k^{sup} - z_k^{piv}}{|z_k^{sup} - z_k^{piv}|}$.

Για $j = 1, \dots, m$

Υπολογισμός των $\zeta_j = z_{k-1}^{piv} + jh$.

Υπολογισμός της τριπλέτας $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ με SVD για τον πίνακα $\zeta_j \mathbf{I} - \mathbf{A}$

Υπολογισμός του z_k^m , σύμφωνα με την σχέση (5.3), αντικαθιστώντας όπου λ το ζ_m .

Θέτουμε $z_k^{piv} = z_k^m$

Τέλος_επανάληψης

Τέλος_επανάληψης

Τέλος.

6.2 Πολυπλοκότητα

Στο σημείο αυτό θα αναλύσουμε την χρονική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου Cobra, επικεντρώνοντας στην σύγκρισή της με αυτήν του αλγορίθμου Path-Following (PF στο εξής).

Έστω C_{tr} το μέσο χρονικό κόστος υπολογισμού της τριπλέτας $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ ενός πίνακα \mathbf{A} . Τότε, με βάση την ανάλυση των Παραγράφων 5.1 και 6.1, το κόστος μιας επανάληψης της Newton-Raphson είναι ίδιο με το C_{tr} . Θα υπολογίσουμε την συνολική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου αθροίζοντας τις πολυπλοκότητες κάθε βήματος του αλγορίθμου για το σύνολο K των ρινot points που επιλέγουμε να χρησιμοποιήσουμε.

Παρατηρούμε ότι για κάθε ρινot point, υπολογίζεται η τριπλέτα μία φορά για την εύρεση του support point και άλλες m φορές, μία για τη διόρθωση κάθε σημείου ζ_i , $i = 1, \dots, m$. Ο διαχωρισμός αυτός γίνεται διότι, όπως προαναφέρθηκε, οι διορθώσεις των m σημείων γίνονται ταυτόχρονα και θέλουμε να τις διαχωρίσουμε από την εύρεση του support point γιατί εδώ ακριβώς εισάγεται ο παραλληλισμός τον οποίο αναλύουμε στη συνέχεια. Συνεπώς τελικά, αν C_{cobra} είναι η πολυπλοκότητα του αλγορίθμου θα έχουμε:

$$C_{cobra} = \sum_K (1+m) C_{tr}. \quad (6.1)$$

Υποθέτουμε ότι ο αλγόριθμος θα δουλέψει με $p \leq m$ παράλληλους επεξεργαστές οι οποίοι υπολογίζουν ταυτόχρονα τις τριπλέτες για τις διορθώσεις των σημείων ζ_i . Τότε το χρονικό κόστος για κάθε ρινot point θα είναι $\left(1 + \left\lceil \frac{m}{p} \right\rceil\right) C_{tr}$, και τελικά η συνολική του πολυπλοκότητα θα είναι:

$$C_{cobra,p} = \sum_K \left(1 + \left\lceil \frac{m}{p} \right\rceil\right) C_{tr}. \quad (6.2)$$

Εκτός από τα παραπάνω, παραλληλισμός μπορεί να εισαχθεί και τον υπολογισμό της τριπλέτας. Τροποποιούμε, λοιπόν το C_{tr} για να αντιστοιχεί στο κόστος υπολογισμού της τριπλέτας σε ένα σύστημα παράλληλων επεξεργαστών, όπως αναλύεται παρακάτω.

Θεωρούμε ένα μοντέλο υπολογιστών με p επεξεργαστές ο καθένας. Αποδεικνύεται ότι το χρονικό κόστος επικοινωνίας μεταξύ των υπολογιστών είναι αμελητέο σε σχέση με το κόστος του αλγορίθμου και μπορούμε να το αγνοήσουμε. Αν άρα $C_{tr,L}$ είναι το κόστος υπολογισμού τις τριπλέτας σε L παράλληλους υπολογιστές, με βάση τα παραπάνω η σχέση (6.2) γίνεται

$$C_{cobra,p} = \sum_K \left(C_{tr,p \times L} + \left\lceil \frac{m}{L} \right\rceil C_{tr,p} \right). \quad (6.3)$$

Για τη σύγκριση της παραπάνω ποσότητας με την χρονική πολυπλοκότητα του αλγορίθμου PF, αναφέρουμε ότι, αν ο PF εκτελεστεί επίσης για K συνολικά σημεία, προκύπτει ότι

$$C_{PF} = \sum_K C_{tr}. \quad (6.4)$$

Επιστρέφοντας στο αρχικό μοντέλο p επεξεργαστών, θεωρούμε ότι κάθε υπολογιστής λειτουργεί με έναν επεξεργαστή και ότι διαθέτουμε p υπολογιστές συνολικά, καθώς και ότι θα επιμερίσουμε το H σε τόσα μέρη όσα και οι επεξεργαστές ($m = p$). Τότε, συγκρίνοντας τις σχέσεις (6.3) και (6.4) προκύπτει ότι

$$\frac{C_{PF}}{C_{cobra,p}} = \frac{\sum_K C_{tr,p \times L}}{\sum_K \left(C_{tr,p \times L} + \left\lceil \frac{m}{p} \right\rceil C_{tr,p} \right)},$$

δηλαδή τελικά

$$\frac{C_{PF}}{C_{cobra,p}} = \frac{KC_{tr,p}}{\frac{K}{m}(C_{tr,p} + C_{tr,1})}. \quad (6.5)$$

Παρατηρούμε ότι ο υπολογισμός της τριπλέτας σε p επεξεργαστές είναι στην καλύτερη περίπτωση p φορές πιο γρήγορος από αυτόν σε έναν επεξεργαστή και στη χειρότερη ίσος με αυτόν. Δηλαδή

$$\frac{C_{tr,1}}{p} \leq C_{tr,p} \leq pC_{tr,1} \quad (6.6)$$

και συνεπώς, από τις σχέσεις (6.5) και (6.6) προκύπτει ότι η βελτίωση της πολυπλοκότητας του αλγορίθμου PF από τον Cobra φράσσεται ως εξής:

$$\frac{m}{m+1} \leq \frac{C_{PF}}{C_{cobra,p}} \leq \frac{m}{2},$$

όπου m ο αριθμός των σημείων που υπολογίζονται για κάθε ζευγάρι pivot και support point. (Bekas & Gallopoulos, 2001)

Συμπερασματικά, ο αριθμός των σημείων που θα υπολογίζονται σε κάθε βήμα του Cobra είναι αυτός που καθορίζει τη βελτίωση της πολυπλοκότητας, η οποία δεν μπορεί να ξεπεράσει την τιμή $m/2$. Συνεπώς, όσο αυξάνεται ο αριθμός των σημείων τόσο καλύτερη και επικερδέστερη από άποψη χρόνου γίνεται η χρήση περισσότερων επεξεργαστών. Εντούτοις, όπως αναφέραμε και παραπάνω, το H δεν συμφέρει να γίνει οσοδήποτε μεγάλο, καθώς ο αλγόριθμος μπορεί να απομακρυνθεί από την πραγματική καμπύλη $\partial\Lambda_\varepsilon$ και να δώσει λάθος αποτελέσματα.

6.3 Αριθμητικά παραδείγματα – Σύγκριση με τον αλγόριθμο Path-Following

Στα πλαίσια της παρούσας διπλωματικής, η πειραματική μελέτη του παραλληλισμού που εισάγει ο αλγόριθμος Cobra δεν ήταν εφικτή, καθώς δεν διαθέτουμε σύστημα παράλληλων επεξεργαστών. Για το λόγο αυτό, παρακάτω θα παρουσιάσουμε παραδείγματα των Μπέκας και Γαλλόπουλος από την μελέτη τους για τον αλγόριθμο.

Εντούτοις, πιστεύουμε πως από τη φύση του αλγορίθμου και τη διαδικασία που ακολουθεί για κάθε ζευγάρι σημείων pivot και support, θα χρειαστεί να υπολογιστούν πολύ λιγότερα σημεία από αυτά που χρειάστηκε ο αλγόριθμος του Brühl για τον υπολογισμό κάθε συνεκτικής συνιστώσας του Λ_ε και άρα θα επιτύχουμε λιγότερο χρόνο ακόμα και χωρίς την εκμετάλλευση του παραλληλισμού.

Ο αλγόριθμος, λοιπόν υλοποιήθηκε σε MATLAB, όπου η διόρθωση των σημείων ζ_i , $i=1, \dots, m$ γίνεται κανονικά, για το ένα σημείο μετά το άλλο. Δεν υπάρχει λόγος να μελετήσουμε παραδείγματα πινάκων μικρού μεγέθους και για το λόγο αυτό ασχοληθήκαμε απευθείας με τα παραδείγματα των πινάκων Kahan και Toeplitz μεγέθους 30.

Εφαρμόζοντας αρχικά τον αλγόριθμο του Brühl στον πίνακα Kahan για $\varepsilon = 0.1$, παρατηρούμε ότι ο αλγόριθμος χρειάστηκε να υπολογιστούν 7000 σημεία της καμπύλης και ο αλγόριθμος τερμάτισε σε 1.5 sec. Στη συνέχεια, εφαρμόζοντας τον αλγόριθμο Cobra στον ίδιο πίνακα, με τις ίδιες ακριβώς παραμέτρους και για $H = 0.064$ και $m = 8$, χρειάστηκαν 150 ζεύγη σημείων, για τα οποία υπολογίστηκαν 8 σημεία στο κάθε ένα, σύνολο 1200 σημεία και ο αλγόριθμος τερμάτισε σε 0.3 sec. Πράγματι λοιπόν, παρατηρείται εμφανής μείωση του χρόνου εκτέλεσης του αλγορίθμου, ακόμα και χωρίς την εκμετάλλευση του παραλληλισμού. Τα συγκριτικά αποτελέσματα της εκτέλεσης των δύο αλγορίθμων για τους πίνακες Kahan και Toeplitz, για $\varepsilon = 0.1$ παρουσιάζονται παρακάτω.

	Αριθμός σημείων PF	Αριθμός σημείων Cobra	Χρόνος εκτέλεσης PF (s)	Χρόνος εκτέλεσης Cobra (s)	Ποσοστό επιτάχυνσης
Kahan	7000	1200	1.5	0.3	80%
Toeplitz	17100	3600	3.76	0.89	

Πίνακας 5: Σύγκριση του αριθμού σημείων και του χρόνου εκτέλεσης των αλγορίθμων PF και Cobra, για τους πίνακες Kahan και Toeplitz μεγέθους 30, για $\varepsilon = 0.1$, $H = 0.064$ και $m = 8$.

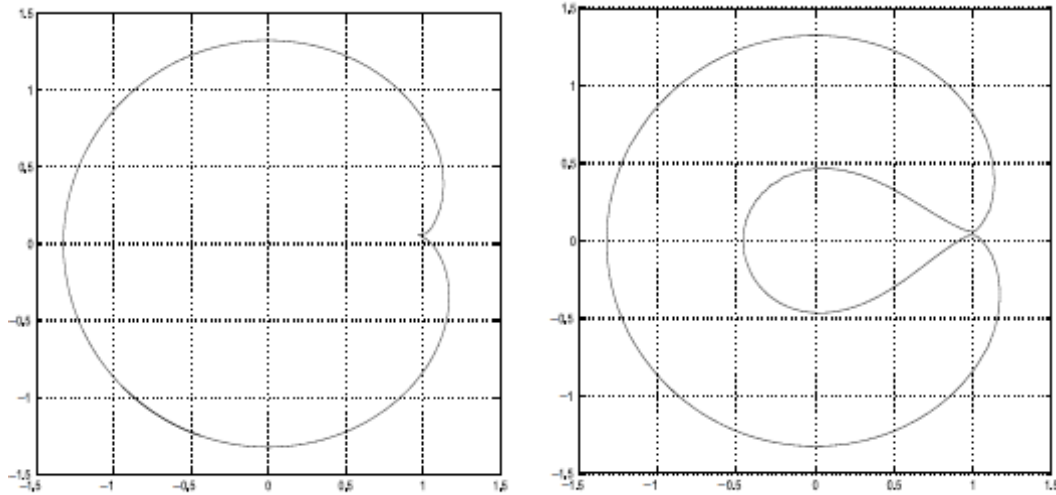
Συνεχίζοντας στην περίπτωση εισαγωγής του παραλληλισμού, για την ανάλυση της εκτέλεσης του αλγορίθμου Cobra θα χρησιμοποιήσουμε τα παραδείγματα των Μπέκας και Γαλλόπουλος, που αφορούν τους πίνακες Fish και Propeller. Ο αριθμός των σημείων ήταν τέτοιος έτσι ώστε και οι δυο αλγόριθμοι να δίνουν επιθυμητό αποτέλεσμα και χρησιμοποιήθηκε σύστημα με $p = m = 8$ επεξεργαστές. Τα αποτελέσματα των χρόνων εκτέλεσης για $\varepsilon = 0.01$ δίνονται στον παρακάτω πίνακα. (Bekas & Gallopoulos, 2001)

	Μέγεθος	Χρόνος εκτέλεσης PF (s)	Χρόνος εκτέλεσης Cobra (s)	Ποσοστό επιτάχυνσης
Fish	100	450	125	72%
	200	4473	1235	
Propeller	100	405	113	
	200	4502	1305	

Πίνακας 6: Σύγκριση του χρόνου εκτέλεσης των αλγορίθμων PF και Cobra, για τους πίνακες Fish και Propeller για $\varepsilon = 0.01$ και $p = m = 8$. (Bekas & Gallopoulos, 2001)

Από τον Πίνακα 5 φαίνεται ότι η βελτίωση του χρόνου εκτέλεσης του αλγορίθμου πλησιάζει το άνω φράγμα το οποίο σύμφωνα με την ανάλυση της Παραγράφου 6.2 θα είναι $m/2 = 8/2 = 4$.

Μετά από την παραπάνω ανάλυση θα εξετάσουμε περιπτώσεις όπου δύο τμήματα του $\partial\Lambda_\varepsilon$ είναι πολύ κοντά το ένα στο άλλο και συγκεκριμένα την περίπτωση του πίνακα Smoke $\in \mathbb{C}^{64 \times 64}$ του οποίου το ψευδοφάσμα για $\varepsilon = 10^{-5}$ φαίνεται παρακάτω. Σε τέτοιες περιπτώσεις, όπως σύντομα αναφέρθηκε στην Παράγραφο 5.2 ο αλγόριθμος Path-Following ενδέχεται να αποτύχει. Αυτό οφείλεται κυρίως σε λάθος επιλογή του βήματος τ και τη λύση δίνει ο αλγόριθμος Cobra.



Εικόνα 20: Το ψευδοφάσμα του πίνακα Smoke μεγέθους 64, για $\varepsilon = 10^{-5}$, με χρήση του αλγορίθμου PF με βήμα $\tau = 0.025$ (αριστερά) και με χρήση του αλγορίθμου Cobra με $H = 0.06$ και $m = 8$ (δεξιά).

Παρατηρούμε ότι το πρόβλημα παρουσιάζεται στην περιοχή του $z = 1$. Βρέθηκε ότι ο αλγόριθμος PF δίνει επιθυμητό αποτέλεσμα εάν χρησιμοποιηθούν τουλάχιστον 600 σημεία, δηλαδή 600 SVD παραγοντοποιήσεις.

Ωστόσο, για το αποτέλεσμα της Εικόνας 20 (δεξιά), ο αλγόριθμος Cobra χρειάστηκε 232 pinot points, συνεπώς 232 βήματα σε καθένα από τα οποία έγιναν $m+1=9$ SVD παραγοντοποιήσεις και άρα συνολικά 2088 υπολογισμοί τριπλέτας. Αφού λοιπόν, με βάση την Παράγραφο 6.2 ένα βήμα του Cobra κοστίζει χρονικά όσο δύο βήματα του PF, στον ίδιο χρόνο ο PF θα είχε καταφέρει να υπολογίσει μόνο 464. Επιπλέον, επειδή όπως είπαμε το H ισοδυναμεί με το βήμα πρόβλεψης τα παρατηρούμε ότι ο αλγόριθμος PF αποτυγχάνει για ένα αρκετά μικρότερο βήμα από αυτό που χρησιμοποιεί ο αλγόριθμος Cobra. Από τα προηγούμενα επαληθεύεται για άλλη μια φορά η προτίμηση του αλγορίθμου Cobra από τον PF από άποψη χρόνου αλλά εδώ και αποτελεσμάτων. (Bekas & Galloroulos, 2001)

Τελειώνοντας την ανάλυση αυτού του αλγορίθμου, επισημαίνεται ότι όσο κι αν αυτός βελτιώνει τον αρχικό αλγόριθμο Path-Following του Brühl, δεν παύει να έχει αναπτυχθεί πάνω σε αυτόν, με κάποιες τροποποιήσεις και κυρίως με την εισαγωγή του παραλληλισμού. Συνεπώς, μειονεκτήματα

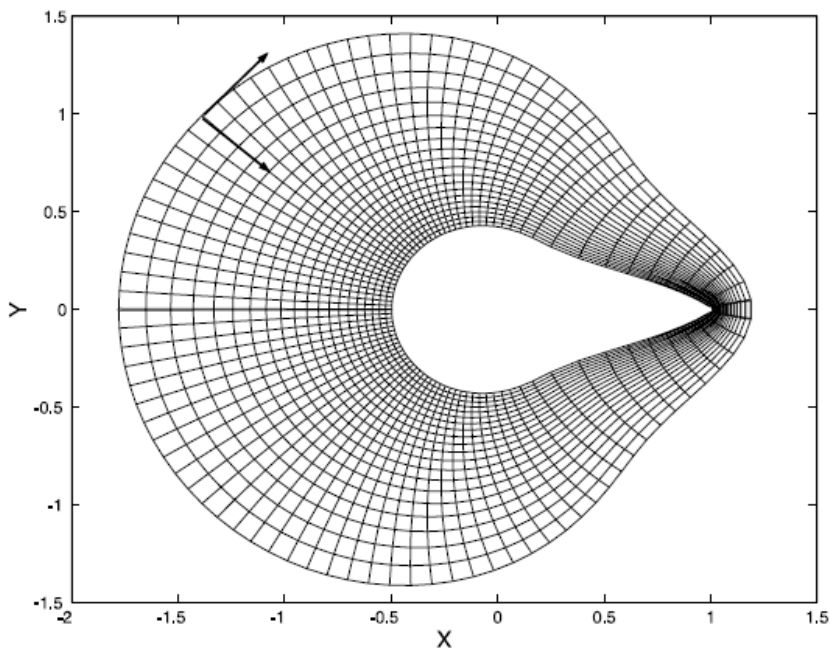
που αναφέρθηκαν στην Παράγραφο 5.2, όπως είναι ο υπολογισμός μόνο μιας συνεκτικής συνιστώσας του ψευδοφάσματος σε περίπτωση μη συνεκτικότητας, η βέλτιστη επιλογή βήματος καθώς και ιδιοτιμής έναρξης για λιγότερες Newton-Raphson επαναλήψεις και η αδυναμία γνώσης a priori τη λύση σε αυτά τα προβλήματα, χωρίς να γίνουν πειραματικές εκτελέσεις του αλγορίθμου και τα οποία προφανώς δεν διορθώνονται με την εισαγωγή του παραλληλισμού, εξακολουθούν να υπάρχουν.

Στο επόμενο κεφάλαιο θα μελετήσουμε μια βελτιωμένη εκδοχή του αλγορίθμου Path-Following, έναν αλγόριθμο που δεδομένης μια ήδη υπάρχουσας καμπύλης $\partial\Lambda_\varepsilon$ για κάποιο ε , μπορεί να υπολογίσει εσωτερικές καμπύλες, δηλαδή καμπύλες για μικρότερα ε .

7. Ο αλγόριθμος Fast Descent – Βελτίωση της ιδέας του path following

Στο συγκεκριμένο κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με τον αλγόριθμο Fast Descent. Πρόκειται για έναν αλγόριθμο που αντιμετωπίζει ένα βασικό μειονέκτημα της γενικής ιδέας του path-following σε σχέση με τη GRID. Συγκεκριμένα, όπως έχουμε ήδη αναφέρει, οι αλγόριθμοι που ακολουθούν το path-following υπολογίζουν μόνο μια συνεκτική συνιστώσα του ψευδοφάσματος σε περίπτωση μη συνεκτικότητας, ενώ όπως είδαμε και την Παράγραφο 3.2, ο αλγόριθμος GRID υπολογίζει κατευθείαν ολόκληρο το ψευδοφάσμα. Βέβαια, ο συγκεκριμένος αλγόριθμος είναι εξαιρετικά αργός και για το λόγο αυτό, πολύ δύσκολα εφαρμόσιμος σε περιπτώσεις μεγάλων πινάκων. Για το λόγο αυτό, οι Μπέκας και Γαλλόπουλος ανέπτυξαν την ιδέα του Fast Descent (γρήγορη «κατάβαση»), ενός αλγορίθμου ο οποίος βασίζεται στον PF, αλλά υπολογίζει όλες τις συνεκτικές συνιστώσες του ψευδοφάσματος.

Πιο συγκεκριμένα, η ιδέα του αλγορίθμου είναι η χρήση μιας ήδη υπολογισμένης, με κάποιον από τους δύο αλγορίθμους path-following (PF ή Cobra), καμπύλης $\partial\Lambda_\varepsilon$ για κάποιο ε , για να υπολογίσει εκ παραλλήλου σημεία μιας νέας $\partial\Lambda_\delta$ τέτοιο ώστε $\delta < \varepsilon$. Αυτό πραγματοποιείται διορθώνοντας τα, έστω K σημεία της αρχικής καμπύλης κατά τη διεύθυνση με τη μεγαλύτερη κλίση (που προσεγγίζει την κάθετη στην καμπύλη στο συγκεκριμένο σημείο, όπως η διόρθωση που έχουμε δει ως τώρα) έτσι ώστε κάθε σημείο $z_k \in \partial\Lambda_\varepsilon$ να δώσει ένα σημείο $w_k \in \partial\Lambda_\delta$. Μια γραφική απεικόνιση της διαδικασίας παρουσιάζεται στην παρακάτω εικόνα.



Εικόνα 21: Γραφική απεικόνιση της εκτέλεσης του αλγορίθμου FD σε έναν πίνακα Kahan μεγέθους 100. Τα βέλη δείχνουν την κατεύθυνση κατά την οποία υπολογίστηκαν οι εξωτερικές καμπύλες με τον αλγόριθμο PF καθώς και τη διεύθυνση διόρθωσης κάθε καμπύλης για τη δημιουργία της αμέσως επόμενης. Τα σημεία τομής των ευθειών είναι τα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος FD. (Bekas & Gallopoulos, 2002)

Η διαδικασία μπορεί να επαναληφθεί περισσότερες φορές, υπολογίζοντας περισσότερες καμπύλες ψευδοφάσματος για διάφορες τιμές του ε , μικρότερες πάντα από την αρχική.

Ο συγκεκριμένος αλγόριθμος χαρακτηρίζεται ως μια «δυναμική» έκδοση του GRID, όπου η μετάβαση από σημείο σε σημείο του grid αντικαθίσταται από την πρόβλεψη-διόρθωση του path-following. (Bekas & Gallopoulos, 2002)

7.1 Ανάλυση και υλοποίηση

Δεδομένης μιας καμπύλης $\partial\Lambda_\varepsilon$ η οποία υπολογίστηκε με κάποιον αλγόριθμο path-following με τη χρήση K σημείων z_k , ένα «πέρασμα» (sweep) του αλγορίθμου Fast Descent για τον υπολογισμό του $\partial\Lambda_\delta$ με $\delta < \varepsilon$ αποτελείται από τα εξής δύο βήματα.

ΒΗΜΑ 1: Ξεκινώντας από ένα σημείο z_k , υπολογίζεται με μια επανάληψη της μεθόδου Newton-Raphson στην κατεύθυνση \mathbf{d}_k κατά την οποία διορθώθηκε το σημείο z_k κατά την εκτέλεση του PF, για την πρόβλεψη \tilde{w}_k . Υπενθυμίζεται ότι, μετά την ανάλυση των δύο αλγορίθμων path-following στις Παραγράφους 5.1 και 6.1, έχουν οι υπολογιστεί οι τριπλέτες για κάθε σημείο z_k , για την εύρεση της κατεύθυνσης της πρόβλεψης του επόμενου σημείου κάθε φορά. Κάνοντας λοιπόν χρήση της ήδη υπολογισμένης τριπλέτας, η πρόβλεψη \tilde{w}_k δίνεται από τον τύπο

$$\tilde{w}_k = z_k - \frac{\varepsilon - \delta}{\mathbf{u}_{\min}^* \mathbf{v}_{\min}} \quad (7.1)$$

όπου $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ η τριπλέτα για το σημείο z_k του $\partial\Lambda_\varepsilon$.

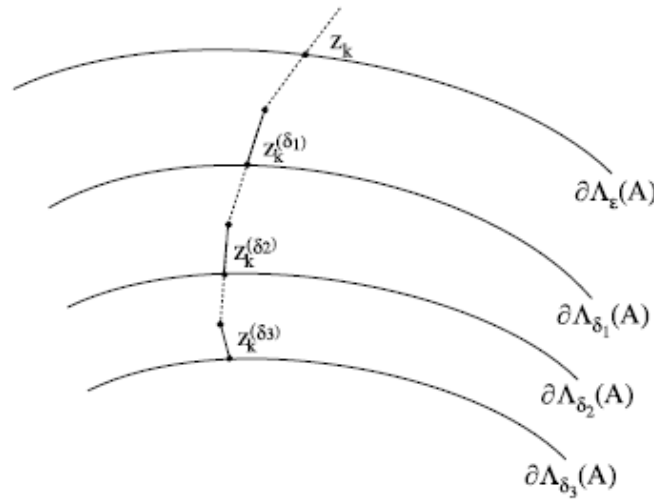
ΒΗΜΑ 2: Διόρθωση της πρόβλεψης \tilde{w}_k , με μια επανάληψη της μεθόδου Newton-Raphson κατά την κατεύθυνση του $\nabla(\tilde{w}_k)$, κάνοντας χρήση του τύπου

$$w_k = \tilde{w}_k - \frac{s_{\min} - \delta}{\mathbf{u}_{\min}^* \mathbf{v}_{\min}} \quad (7.2)$$

όπου $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ η τριπλέτα για το σημείο \tilde{w}_k .

Οι υπολογισμοί των σημείων w_k είναι ανεξάρτητοι μεταξύ τους και άρα, όπως και στον αλγόριθμο Cobra, μπορούν να υπολογιστούν παράλληλα.

Από τα παραπάνω, φαίνεται πως, εφόσον έχουμε υπολογίσει την τριπλέτα για το \tilde{w}_k , μπορούμε να εφαρμόσουμε την μέθοδο για τον υπολογισμό ακόμη ενός επιπέδου του ψευδοφάσματος για κάποιο $\delta' < \delta$. Επαγωγικά, ο αλγόριθμος δεδομένου του $\partial\Lambda_\varepsilon$ υπολογίζει συνολικά M επίπεδα του ψευδοφάσματος, $\partial\Lambda_{\delta_i}$, $i=1, \dots, M$, όπου $\delta_1 < \delta_2 < \dots < \delta_M$ κάνοντας χρήση του $\partial\Lambda_{\delta_{i-1}}$ για τον υπολογισμό του $\partial\Lambda_{\delta_i}$. Σημειώνεται ότι όλες αυτές οι καμπύλες αποτελούνται από K το σύνολο σημεία, γεγονός που ίσως δεν είναι βέλτιστο. Η παρατήρηση αυτή αναλύεται περαιτέρω παρακάτω. (Bekas & Gallopoulos, 2002)



Εικόνα 22: Σχηματική απεικόνιση του αλγορίθμου Fast Descent. (Bekas & Gallopoulos, 2002)

Η παραπάνω ανάλυση συνοψίζεται στον παρακάτω ψευδοκώδικα.

ΕΙΣΟΔΟΣ:

$$\mathbf{A} \in \mathbb{C}^{n \times n}, \varepsilon > 0, \delta_1 > \delta_2 > \dots > \delta_M$$

(Παραλείπονται οι παράμετροι που χρειάζεται ο εκάστοτε αλγόριθμος path-following που θα χρησιμοποιηθεί).

ΒΗΜΑ 0: Υπολογισμός του πρώτου επιπέδου $\partial\Lambda_\varepsilon$ με χρήση του αλγορίθμου PF ή Cobra.

(Σημείωση: Οι τριπλέτες για τη διόρθωση κάθε σημείου αποθηκεύονται για να χρησιμοποιηθούν από τα βήματα του FD).

Για $i = 1, 2, \dots, M$

ΒΗΜΑ 1: Υπολογισμός των \tilde{w}_k κάνοντας χρήση του τύπου (7.1), όπου ε ή το αρχικό, ή το δ_{i-1}

ΒΗΜΑ 2: Υπολογισμός της τριπλέτας $(s_{\min}, \mathbf{u}_{\min}, \mathbf{v}_{\min})$ για το σημείο \tilde{w}_k .

Διόρθωση των σημείων \tilde{w}_k κάνοντας χρήση του τύπου (7.2)

Τέλος_επανάληψης

7.1.1 Προσαρμογή του αριθμού υπολογιζόμενων σημείων καμπύλης

Όπως αναφέραμε σύντομα στην προηγούμενη παράγραφο, ο αλγόριθμος Fast Descent υπολογίζει τον ίδιο αριθμό σημείων σε κάθε καμπύλη για κάθε τιμή του δ , γεγονός που σε αρκετές περιπτώσεις δεν είναι βέλτιστο για δύο λόγους. Ο πιο προφανής είναι ότι, όσο μικραίνει το δ αν το ψευδοφάσμα είναι συνεκτικό, αναμένεται να μικρύνει και το μήκος της καμπύλης $\partial\Lambda_\delta$ και άρα, θα χρειάζεται να υπολογιστούν λιγότερα σημεία για την απεικόνιση ολόκληρης της καμπύλης. Ο δεύτερος λόγος είναι ότι αν μικραίνοντας το δ το ψευδοφάσμα πάγει να είναι συνεκτικό, το συνολικό μήκος των καμπυλών μπορεί να είναι μεγαλύτερο από αυτό της αρχικής καμπύλης και άρα θα χρειαστεί να υπολογιστούν περισσότερα σημεία για την ακριβέστερη απεικόνιση του ψευδοφάσματος.

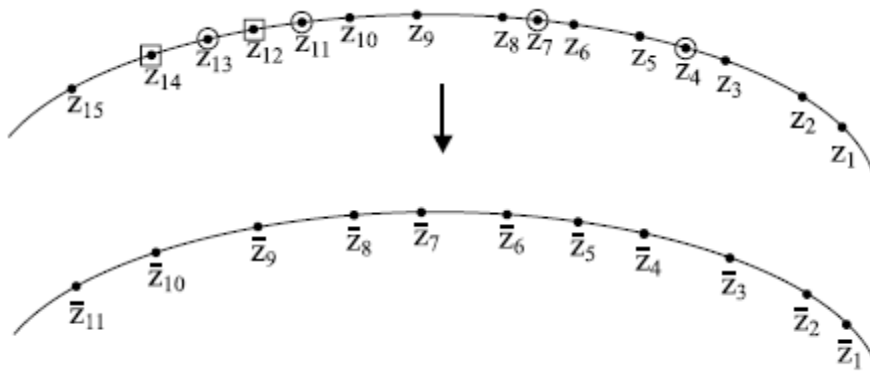
Συνεπώς, είναι λογικό να μετρηθεί η οποιαδήποτε σημαντική αλλαγή μήκους της καμπύλης για κάποιο δ και τα σημεία που υπολογίζονται κατά το πέρασμα του αλγορίθμου Fast Descent για το συγκεκριμένο δ να προσαρμοστεί ανάλογα.

Στη συνέχεια θα ασχοληθούμε με την περίπτωση ελάττωσης του μήκους της καμπύλης όσο μικραίνει το δ , σημειώνοντας ότι ανάλογη τακτική μπορεί να ακολουθηθεί στην αντίθετη περίπτωση. Θα περιγράψουμε την περίπτωση μετάβασης του αλγορίθμου από το $\partial\Lambda_{\delta_m}$ στο $\partial\Lambda_{\delta_{m+1}}$, όπου $\delta_m > \delta_{m+1}$ και έστω K_m ο αριθμός των σημείων που υπολογίστηκε για το δ_m . Ο αλγόριθμος τροποποιείται έτσι ώστε να αποκλείσει έναν αριθμό σημείων, έστω M για τον υπολογισμό του $\partial\Lambda_{\delta_{m+1}}$, υπολογίζοντας τελικά $K_m - M$ σημεία. Η διαδικασία του αποκλεισμού περιγράφεται παρακάτω.

Αρχικά υπολογίζονται οι αποστάσεις μεταξύ των διαδοχικών σημείων που υπολογίστηκαν για την καμπύλη $\partial\Lambda_{\delta_m}$, έστω $d_k = |z_k - z_{k+1}|$ καθώς και η ελάχιστη αυτών, έστω l_m . Στη συνέχεια, αποκλείονται τα σημεία z_k για τα οποία ισχύει

$$d_k + d_{k+1} < 2l_{m-1}, \quad (7.3)$$

εκτός εάν το προηγούμενο σημείο z_{k-1} έχει κι αυτό αποκλειστεί. Το πρώτο και το τελευταίο σημείο, στη συγκεκριμένη υλοποίηση κρατούνται σταθερά. (Bekas & Gallopoulos, 2002)



Εικόνα 23: Η διαδικασία αποκλεισμού των σημείων. (Bekas & Gallopoulos, 2002)

Στην παραπάνω εικόνα παρουσιάζεται σχηματικά η παραπάνω διαδικασία. Τα σημεία για τα οποία ισχύει η συνθήκη (7.3) σημειώνονται μέσα σε κύκλο ή τετράγωνο και τελικά, αποκλείονται μόνο τα σημεία που βρίσκονται μέσα σε κύκλο διότι μόνο σε αυτές τις περιπτώσεις, όπως βλέπουμε, δεν έχει αποκλειστεί το προηγούμενο σημείο.

7.2 Πολυπλοκότητα

Στο σημείο αυτό θα αναφερθούμε στην πολυπλοκότητα του αλγορίθμου Fast Descent κάνοντας αναφορά και στην εισαγωγή του παραλληλισμού για τον υπολογισμό των σημείων w_k .

Θεωρούμε ότι το κόστος υπολογισμού των ενδιάμεσων σημείων \tilde{w}_k είναι μικρό, εφόσον έχει ήδη υπολογιστεί η τριπλέτα που χρησιμοποιείται στο Βήμα 1, από τη διαδικασία υπολογισμού του προηγούμενου επιπέδου του ψευδοφάσματος. Ο υπολογισμός των σημείων w_k απαιτεί τον υπολογισμό τριπλέτας για K σημεία.

Έστω C_{tr} το μέσο χρονικό κόστος υπολογισμού μιας τριπλέτας. Συνεπώς, το κόστος ενός «περάσματος» του FD υπολογίζεται ως $C_{FDstep} = KC_{tr}$. Όπως είπαμε, ο υπολογισμός των σημείων w_k γίνεται εκ παραλλήλου.

Έστω λοιπόν ένα μοντέλο συστήματος με p επεξεργαστές. Τότε, κάθε επεξεργαστής θα μπορεί να υπολογίσει το πολύ $\lceil K/p \rceil$ σημεία. Συνεπώς το κόστος διαμορφώνεται ως $C_{FDstep} = \lceil K/p \rceil C_{tr}$. (Bekas & Gallopoulos, 2002)

Τέλος, θα αναφερθούμε σύντομα στη σημασία του τρόπου διαμοίρασης του υπολογισμού των σημείων μεταξύ των επεξεργαστών. Οι Μπέκας και Γαλλόπουλος προτείνουν τους εξής τρόπους. Ο πρώτος αφορά τον διαμοιρασμό των σημείων με τη σειρά υπολογισμού τους, περνώντας στον

επόμενο επεξεργαστή όταν ο προηγούμενος αναλάβει $\lceil K/p \rceil$ σημεία (Block partitioning). Ο δεύτερος τρόπος εμπεριέχει μια δυναμικότερη προσέγγιση. Βασίζεται στην πειραματική παρατήρηση ότι για κάποια σημεία ο υπολογισμός της τριπλέτας είναι πολύ πιο χρονοβόρος από κάποια άλλα. Θεωρείται επίσης, ότι ο χρόνος υπολογισμού της τριπλέτας θα είναι περίπου ίδιος για γειτονικά σημεία. Συνεπώς, σε αυτή την περίπτωση τα σημεία μοιράζονται με τέτοιο τρόπο, ώστε τα «χρονοβόρα» σημεία να μοιραστούν όσο περισσότερο γίνεται μεταξύ των επεξεργαστών (Cyclic partitioning).

Στα πλαίσια της συγκεκριμένης εργασίας, εφόσον δεν υπάρχει η δυνατότητα πειραματικής εκτέλεσης του παραλληλισμού δεν θα ασχοληθούμε περαιτέρω με αυτό το ζήτημα. Στον παρακάτω πίνακα παρουσιάζεται η πειραματική σύγκριση των δύο παραπάνω μεθόδων για τον πίνακα Gre μεγέθους 1107, ενός αραιού πραγματικού και μη συμμετρικού πίνακα από την συλλογή Harwell-Boeing.

	Αριθμός επεξεργαστών	1	2	4	8
Block partitioning	Χρόνος εκτέλεσης (s)	6000	3750	2500	1390
	Speedup	1	1.6	2.4	4.3
Cyclic partitioning	Χρόνος εκτέλεσης (s)	6000	3060	1560	840
	Speedup	1	1.96	3.9	7.14

Πίνακας 7: Σύγκριση των δύο μεθόδων διαμοιρασμού των σημείων στην περίπτωση του παραλληλισμού και για έναν συγκεκριμένο πίνακα. (Bekas & Galloroulos, 2002)

Τέλος, όσον αφορά τον παραλληλισμό, η συγκεκριμένη υλοποίηση θεωρεί ότι η διαδικασία αποκλεισμού γίνεται σε έναν μόνο επεξεργαστή και τα σημεία που δεν αποκλείονται εξακολουθούν να διαμοιράζονται με έναν από τους δύο τρόπους που αναφέρονται παραπάνω.

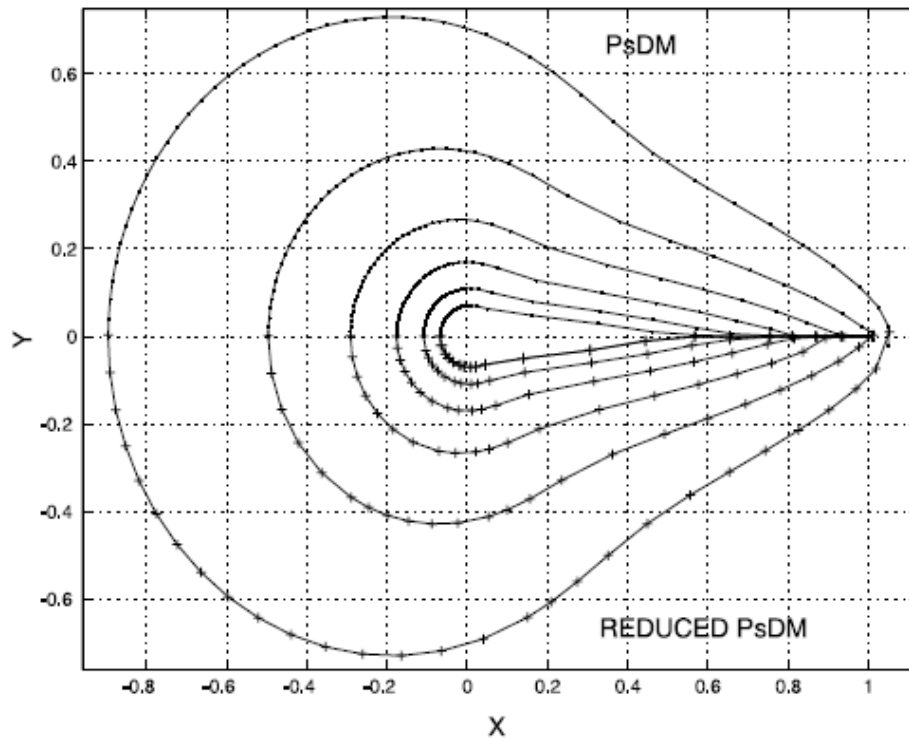
7.3 Αριθμητικά παραδείγματα – Ανάλυση εκτέλεσης

Όπως και στην περίπτωση του αλγορίθμου Cobra, έτσι και εδώ δεν υπάρχει δυνατότητα πειραματικής ενασχόλησης με τον παραλληλισμό που εισάγεται στον αλγόριθμο. Εντούτοις, υλοποιήσαμε τον αλγόριθμο Fast Descent σε MATLAB, κάνοντας χρήση του αλγορίθμου Path-Following του Brühl – αφού έτσι κι αλλιώς δεν θα ασχοληθούμε με τον παραλληλισμό – για το Βήμα 0. Στόχος σε αυτή τη φάση είναι η σύγκριση του χρόνου υπολογισμού διαφορετικών καμπυλών του ψευδοφάσματος με τους δύο αυτούς αλγορίθμους.

Θα ασχοληθούμε με τον πίνακα Kahan, μεγέθους 30 έτσι ώστε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα με αυτά της Παραγράφου 5.2. Εκτελώντας τον αλγόριθμο για $\varepsilon = 0.1$ και $\delta = [0.01, 0.001]$, τις

ίδιες δηλαδή τιμές για τις οποίες υπολογίστηκε το σύνορο του ψευδοφάσματος του πίνακα Kahan στην Παράγραφο 5.2, και για $K = 7000$, ο αριθμός των σημείων που χρειάστηκαν για τον υπολογισμό της μεγαλύτερης σε μήκος καμπύλης του $\partial\Lambda_\varepsilon$ στο παράδειγμα της Παραγράφου 5.2, ο αλγόριθμος Fast Descent τερμάτισε δίνοντας επιθυμητά αποτελέσματα σε 4.65 sec. Υπενθυμίζεται ότι, ο αλγόριθμος Path-Following χρειάστηκε περίπου 2.2 sec για τον υπολογισμό κάθε μιας από τις παραπάνω καμπύλες, άρα συνολικά χρειάστηκαν περίπου 6.6 sec. Παρατηρούμε λοιπόν ότι ακόμα και χωρίς καμία εκμετάλλευση του παραλληλισμού, καθώς και με τον υπολογισμό του ίδιου αριθμού σημείων κάθε φορά, σε αντίθεση με τον Πίνακα 2 της Παραγράφου 5.2, όπου για κάθε διαφορετικό ε χρησιμοποιήθηκε και διαφορετικός αριθμός σημείων, ο υπολογισμός του ψευδοφάσματος επισπεύτηκε κατά το 1/3 του χρόνου, κάνοντας χρήση του αλγορίθμου Fast Descent.

Στη συνέχεια θα ασχοληθούμε με τη μέθοδο αποκλεισμού σημείων με εκμετάλλευση του παραλληλισμού, καθώς δεν πιστεύουμε ότι χωρίς αυτόν η διαδικασία αποκλεισμού θα επιφέρει σημαντικές αλλαγές στο συνολικό χρόνο εκτέλεσης. Παρακάτω παρατίθενται, για έναν πίνακα Kahan μεγέθους 100, η γραφική απεικόνιση του ψευδοφάσματος, για $\varepsilon = 10^{-2}, \dots, 10^{-7}$, όπως αυτό υπολογίστηκε με και χωρίς αποκλεισμό σημείων, καθώς και οι χρόνοι εκτέλεσης και η επιτάχυνση του υπολογισμού, για κάθε έναν από τους τρόπους διαμοιρασμού σημείων όπως αναλύονται στην Παράγραφο 7.2, όπως υπολογίστηκαν από τους Μπέκα και Γαλλόπουλο. Παρατηρούμε ότι υπολογίζονται πολύ λιγότερα σημεία, ενώ η ποιότητα της καμπύλης δεν έχει αλλοιωθεί.

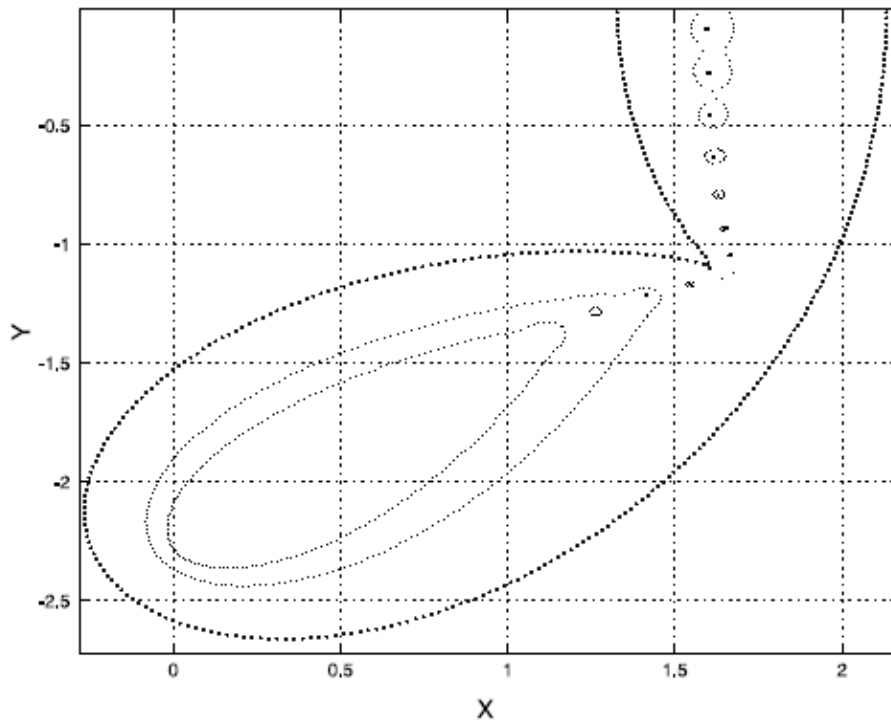


Εικόνα 24: Το ψευδοφάσμα του πίνακα Kahan μεγέθους 100, για τις επιλεγμένες τιμές του ϵ χωρίς αποκλεισμό (επάνω) και με αποκλεισμό σημείων (κάτω). (Bekas & Gallopoulos, 2002)

Αριθμός επεξεργαστών	Block partitioning	Cyclic partitioning
1	364	--
2	189 (1.93)	181 (2.01)
4	115 (3.17)	94 (3.87)
8	60 (6.06)	58 (6.28)

Πίνακας 8: Οι χρόνοι εκτέλεσης για τον υπολογισμό των καμπυλών της Εικόνας 24 με αποκλεισμό σημείων και οι αντίστοιχες επιταχύνσεις (σε παρένθεση). (Bekas & Gallopoulos, 2002)

Τέλος, όπως αναφέραμε και στην αρχή του κεφαλαίου, ο αλγόριθμος Fast Descent υπολογίζει επιτυχώς όλες τις συνεκτικές συνιστώσες του ψευδοφάσματος σε περίπτωση μη συνεκτικότητας, δεδομένου βέβαια, ότι το ψευδοφάσμα για την αρχική τιμή του ϵ είναι συνεκτικό. Παρακάτω, επιβεβαιώνουμε πειραματικά την παραπάνω ιδιότητα, στην περίπτωση του πίνακα Toerliz μεγέθους 50. Ο αλγόριθμος εκτελέστηκε για $\epsilon = 10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-6}$.



Εικόνα 25: Μέρος του ψευδοφάσματος του πίνακα Toeplitz μεγέθους 50, για $\varepsilon = 10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-6}$, όπως υπολογίστηκε με τον αλγόριθμο Fast Descent. (Bekas & Galloroulos, 2002)

8. Συμπεράσματα

Αφού μελετήσαμε ξεχωριστά την θεωρία και την πειραματική εκτέλεση κάθε αλγορίθμου, παρακάτω θα παρουσιάσουμε συγκεντρωτικά τα συμπεράσματα που προκύπτουν για κάθε αλγόριθμο και να τους συγκρίνουμε μεταξύ τους.

Ξεκινάμε με τον αλγόριθμο GRID, τον απλούστερο μεταξύ των αλγορίθμων που μελετήσαμε. Ο αλγόριθμος επιλέγει ένα πλέγμα του επιπέδου, ανάλογα με την τιμή του ε , και υπολογίζει την ποσότητα $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ για κάθε σημείο z του πλέγματος. Συνεπώς με βάση την σχέση (*) της Παραγράφου 2.3, ο αλγόριθμος μπορεί να σχεδιάζει κατευθείαν το $\partial\Lambda_\varepsilon$ και για οποιαδήποτε άλλη τιμή ε , δεδομένου πάντα ότι αυτή είναι μικρότερη από την αρχική, χωρίς επανάληψη της διαδικασίας των SVD παραγοντοποιήσεων. Βέβαια, όπως βλέπουμε στην Εικόνα 7, ενδέχεται να μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον παραπάνω παραλληλισμό και για τιμές μεγαλύτερες τις αρχικής, αν το χωρίο είναι αρκετά μεγάλο, κάτι που διαπιστώνεται μόνο πειραματικά. Το μεγαλύτερο πρόβλημα του αλγορίθμου είναι η εξάρτηση της επιτυχούς εκτέλεσης από την επιλογή του αρχικού πλέγματος. Στο Κεφάλαιο 3 προτείναμε τέσσερεις μεθόδους επιλογής αρχικού χωρίου, έτσι ώστε να εξασφαλίσουμε ότι αυτό θα περιέχει και τελικά χρησιμοποιήσαμε στην εκτέλεση την απλούστερη μορφή της μεθόδου του Αριθμητικού Πεδίου του πίνακα. Ακόμα και με χρήση αυτής τις βέλτιστης μεθόδου, το αρχικό πλέγμα ενδέχεται να υπολογιστεί πολύ μεγαλύτερο της αρχικής καμπύλης που θέλουμε να υπολογίσουμε και άρα να πρέπει να γίνουν πολύ περισσότερες SVD παραγοντοποιήσεις από τις απαιτούμενες, γεγονός που, όπως είδαμε, όσο αυξάνεται το μέγεθος του πίνακα αποτρέπει τη χρήση του GRID, καθώς αυξάνεται σημαντικά ο χρόνος εκτέλεσης. Αναφέρουμε συγκεκριμένα ότι από τα παραδείγματα της Παραγράφου 3.2, παρατηρήσαμε ότι ο χρόνος εκτέλεσης ήταν 200 φορές μεγαλύτερος στην περίπτωση πινάκων με μέγεθος μόλις 20 φορές μεγαλύτερο. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσίασε η περίπτωση του πίνακα Toeplitz, όπου ο διπλασιασμός του μεγέθους του αύξησε το χρόνο εκτέλεσης του αλγορίθμου από 12 sec σε 200 sec, για την ίδια τιμή του ε , 0.001. Όμως ο αλγόριθμος είναι εξαιρετικά απλός και σταθερός, δηλαδή δίνει εγγυημένα σωστό αποτέλεσμα, και επίσης εκμεταλλεύεται στο έπακρο τη διαδικασία του παραλληλισμού, αφού όχι μόνο μπορεί να υπολογίσει πολλά επίπεδα του ψευδοφάσματος με μια μόνο εκτέλεση, αλλά αυτό μπορεί να γίνει και ταυτόχρονα, αν διατίθεται σύστημα παράλληλων επεξεργασιών.

Οι Κούτης και Γαλλόπουλος θέλησαν να βελτιώσουν τον αλγόριθμο GRID έτσι ώστε να μειωθεί η εξάρτηση του χρόνου εκτέλεσής του από το μέγεθος του χωρίου, όσο μεγάλο κι αν είναι αυτό. Έτσι προέκυψε ο αλγόριθμος Inclusion-Exclusion ο οποίος, δεδομένου του αρχικού πλέγματος που δίνει

και ο GRID, ελέγχει και αποκλείει σημεία του που δεν ανήκουν στο ψευδοφάσμα, με βάση τα Θεωρήματα 4.2 και 4.9. Η χρήση του πρώτου των θεωρημάτων δίνει περιοχές του πλέγματος οι οποίες μπορούν σίγουρα να αποκλειστούν, ελέγχοντας για ένα σημείο z του πλέγματος αν ισχύει η ανίσωση $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) > \varepsilon$, άρα τα σημεία δεν ανήκει στο ψευδοφάσμα, και αποκλείοντας όλα τα σημεία που απέχουν από αυτό απόσταση ίση με $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A}) - \varepsilon$, και συνεχίζοντας στο αμέσως επόμενο μη-αποκλεισμένο σημείο, διαπερνώντας το πλέγμα από αριστερά προς τα δεξιά και από πάνω προς τα κάτω. Η χρήση του δεύτερου των θεωρημάτων δίνει περιοχές πιθανού αποκλεισμού, μεγαλώνοντας την ακτίνα αποκλεισμού. Στη συνέχεια διορθώνει, όπως αναλύεται στην παράγραφο 4.1 τυχόν λανθασμένους αποκλεισμούς. Όπως βλέπουμε και από τις εικόνες της Παραγράφου 4.2, οι λανθασμένοι αποκλεισμοί είναι σπάνιοι. Ο Πίνακας 1 δίνει τη σύγκριση μεταξύ των σημείων για τα οποία τελικά υπολογίζεται η $s_{\min}(z\mathbf{I} - \mathbf{A})$ μετά τους αποκλεισμούς για κάθε μια από τις δύο παραλλαγές του αλγορίθμου αλλά και αυτών που θα υπολόγιζε ο αλγόριθμος GRID. Παρατηρούμε ότι ακόμα και ο απλός αλγόριθμος Inclusion-Exclusion πετυχαίνει μείωση των σημείων της τάξης του 90% για τον πίνακα Kahan και της τάξης του 40% για τον πίνακα Toeplitz. Η διαφορά μεταξύ των ποσοστών οφείλεται στο γεγονός ότι όπως φαίνεται και στις εικόνες των Κεφαλαίων 3 και 4, το αρχικό χωρίο προσεγγίζει πολύ καλύτερα το ψευδοφάσμα του πίνακα Toeplitz, άρα δεν υπάρχουν πολλά περιθώρια μείωσης των σημείων, από αυτό του πίνακα Kahan. Ακόμα και σε αυτή τη περίπτωση όμως, επιτυγχάνεται μια αρκετά σημαντική μείωση. Σε αυτή την καλή προσαρμογή οφείλεται επίσης και η μικρή διαφορά των υπολογιζόμενων σημείων μεταξύ των αλγορίθμων Standard και Large IE. Υπάρχουν, λοιπόν, περιπτώσεις όπου μπορεί να χρησιμοποιηθεί και ο απλός αλγόριθμος Inclusion-Exclusion, έτσι ώστε να αποφευχθεί η διαδικασία των διορθώσεων, χωρίς μεγάλη βλάβη του χρόνου εκτέλεσης, αν το χωρίο προσεγγίζει καλά το $\partial\Lambda_\varepsilon$. Βέβαια, το κατά πόσο καλή ή όχι είναι η προσαρμογή δεν μπορεί να υπολογιστεί παρά μόνο πειραματικά, με εκτέλεση κάποιου από τους τρεις αλγορίθμους.

Όσον αφορά τον παραλληλισμό, ο Inclusion-Exclusion έχει ακόμα περισσότερες δυνατότητες εκμετάλλευσης από τον GRID, καθώς κάποιοι από τους αποκλεισμούς μπορούν να γίνουν ταυτόχρονα. Όσον αφορά τις καμπύλες, εδώ μπορούν μετά τη διαδικασία αποκλεισμού να υπολογιστούν καμπύλες μόνο στο εσωτερικό της αρχικής, αφού στο εξωτερικό τα σημεία έχουν αποκλειστεί.

Περνώντας στην δεύτερη κατηγορία αλγορίθμων, μελετήσαμε αρχικά τον πρώτο path-following αλγόριθμο, που ανέπτυξε ο Brühl. Σε σχέση με τους προηγούμενους αλγορίθμους, αυτή η κατηγορία πλεονεκτεί στο ότι η εκτέλεση δεν εξαρτάται καθόλου από κάποιο αρχικό χωρίο, άρα

δεν ελλοχεύει ο κίνδυνος αποτυχίας, αν το χωρίο δεν είναι σωστό, αν δηλαδή δεν περιέχει μέρος του ψευδοφάσματος. Γενικότερα, ο αριθμός των SVD παραγοντοποιήσεων μειώνεται αρκετά. Όλοι οι αλγόριθμοι που μελετήσαμε σε αυτή την κατηγορία βασίζονται και βελτιώνουν στον αρχικό αλγόριθμο του Brühl που μελετήσαμε στο Κεφάλαιο 5. Όπως είδαμε, ο αλγόριθμος ξεκινά πολύ κοντά σε μια ιδιοτιμή του πίνακα και βρίσκει ένα πρώτο σημείο το οποίο ανήκει στο $\partial\Lambda_\varepsilon$, με τη χρήση της αριθμητικής μεθόδου Newton-Raphson πάνω σε μία τυχαία κατεύθυνση. Η διαδικασία αυτή αναλύεται στην Υποπαράγραφο 5.1.1. Στα παραδείγματα της Παραγράφου 5.2 ως κατεύθυνση της Newton-Raphson επιλέχθηκε πάντα η διχοτόμος πρώτου-τρίτου τεταρτημορίου. Αφού βρεθεί το πρώτο σημείο, ο αλγόριθμος συνεχίζει εκτελώντας επαναληπτικά τη μέθοδο Πρόβλεψης-Διόρθωσης, έως ότου βρεθούν όλα τα σημεία της καμπύλης $\partial\Lambda_\varepsilon$. Αρχικά, προβλέπεται το επόμενο σημείο, σε κατεύθυνση παράλληλη στην μέχρι τώρα ευρεθείσα καμπύλη και για ένα δεδομένο βήμα πρόβλεψης τ και στη συνέχεια διορθώνεται, με μια επανάληψη της Newton-Raphson. Η διαδικασία αυτή αναλύεται λεπτομερώς στην Υποπαράγραφο 5.1.2. Σε σχέση με την εκτέλεση του αλγορίθμου παρατηρήσαμε ότι η παραπάνω διαδικασία χρειάζεται κανονικά δύο SVD παραγοντοποιήσεις ανά βήμα, αφού υπολογίζονται δύο ανάδελα, ένα για την εύρεση της κατεύθυνσης \mathbf{r}_k για την πρόβλεψη κι ένα στο προβλεπόμενο σημείο για τη διόρθωση. Αυτές οι δύο παραγοντοποιήσεις στην πράξη θα καθιστούσαν τον αλγόριθμο πάρα πολύ αργό. Έτσι, διαπιστώθηκε ότι μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε μόνο μια SVD ανά βήμα, χρησιμοποιώντας το ανάδελα του προηγούμενου σημείου για τη διόρθωση αντί γι' αυτό της πρόβλεψης. Αυτή η αντικατάσταση δεν επηρεάζει την ορθότητα του αλγορίθμου, αφού τα δύο ανάδελα που χρησιμοποιούνταν είναι σχεδόν παράλληλα, για κατάλληλα μικρό βήμα τ . Το συγκεκριμένο βήμα αποτελεί βασικό μέρος του αλγορίθμου το οποίο παρουσιάζει αρκετό ενδιαφέρον. Συγκεκριμένα, δεν μπορούμε να επιλέξουμε πάρα πολύ μικρό βήμα, γιατί έτσι θα χρειαστούμε να υπολογιστούν πολύ περισσότερα σημεία για την εύρεση όλου του συνόρου. Βέβαια, το βήμα δεν μπορεί επίσης να είναι και πολύ μεγάλο, γιατί μπορεί ο αλγόριθμος να ξεφύγει από την καμπύλη που ακολουθεί και να δώσει λάθος αποτελέσματα. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελούν περιπτώσεις όπου δύο κλάδοι του αλγορίθμου είναι πολύ κοντά μεταξύ τους, κι ένα μεγάλο τ θα οδηγούσε στην μετάβαση του αλγορίθμου από τον ένα κλάδο στον άλλο σε κάποιες επαναλήψεις.

Εκτελώντας τον αλγόριθμο του Brühl διαπιστώσαμε αρχικά ότι σε περίπτωση μη συνεκτικότητας του Λ_ε , μια εκτέλεσή του υπολογίζει μόνο μια από τις συνεκτικές συνιστώσες, αυτή που αναπτύσσεται γύρω από την ιδιοτιμή από την οποία ξεκίνησε. Αυτό αποτελεί βασικό μειονέκτημα των αλγορίθμων αυτής της κατηγορίας, το οποίο ξεπερνιέται μόνο πειραματικά, εκτελώντας τον

αλγόριθμο και διαπιστώνοντας από ποιες άλλες ιδιοτιμές πρέπει να ξεκινήσουμε έτσι ώστε να βρεθούν όλοι οι κλάδοι. Επιπλέον, όπως είδαμε και όπως συνοψίζεται και στον Πίνακα 2, ο αριθμός επαναλήψεων που χρειάζονται έτσι ώστε η Newton-Raphson να βρει το πρώτο σημείο πάνω στο σύνορο με την επιθυμητή ακρίβεια (στις εκτελέσεις μας πάντα 10^{-6}) δεν είναι ο ίδιος. Αυτό συμβαίνει διότι η απόσταση του συνόρου από την αρχική ιδιοτιμή δεν είναι σταθερή παρά μόνο αν το ψευδοφάσμα είναι τέλειος κύκλος. Η έλλειψη δυνατότητας εύρεσης της ιδανικής κατεύθυνσης είναι άλλο ένα μειονέκτημα της κατηγορίας, αφού και αυτή μπορεί να βρεθεί μόνο πειραματικά. Το τελευταίο μειονέκτημα που διαπιστώσαμε είναι η αδυναμία να γνωρίζουμε εξ' αρχής πόσα σημεία πρέπει να υπολογιστούν για να βρεθεί κάθε καμπύλη ολόκληρη, ένα ερώτημα που επίσης απαντάται μόνο πειραματικά. Παρ' όλα αυτά ο αλγόριθμος είναι πολύ σταθερός και δίνει σωστά αποτελέσματα, και για κατάλληλη επιλογή του βήματος τ ο αριθμός των υπολογιζόμενων σημείων μειώνεται δραστικά, σε σχέση με τον αλγόριθμο Inclusion-Exclusion. Η διαφορά αυτή φαίνεται στη σύγκριση των τιμών των Πινάκων 1, 3 και 4. Συγκεκριμένα, ο αριθμός των σημείων κατά 86% σε σχέση με τον αλγόριθμο Large IE για τον πίνακα Kahan και κατά 90% για τον πίνακα Toeplitz.

Τα παραπάνω μειονεκτήματα αφορούν και τον αλγόριθμο Cobra που μελετήσαμε στο Κεφάλαιο 6. Η βελτίωση που επιφέρει ο Cobra είναι η εισαγωγή του παραλληλισμού στην ιδέα του path-following. Όπως είναι φυσικό, στον αλγόριθμο του Brühl δεν γίνεται καμία εκμετάλλευση του παραλληλισμού, αφού για τον υπολογισμό κάποιου σημείου χρειάζεται να έχει ήδη υπολογιστεί ο προηγούμενο. Στον αλγόριθμο Cobra, η μόνη διαφορά είναι ότι δεδομένων δύο σημείων του συνόρου που έχουν υπολογιστεί, προβλέπεται ένας προκαθορισμένος αριθμός επόμενων σημείων πάνω στην ευθεία που αυτά ορίζουν, σε ίσες αποστάσεις μεταξύ τους. Στη συνέχεια, τα σημεία αυτά διορθώνονται ταυτόχρονα με τη χρήση παράλληλων επεξεργαστών. Στα πλαίσια της συγκεκριμένης εργασίας δεν ήταν εφικτή η χρήση παραλληλίας. Εντούτοις, ο αλγόριθμος υλοποιήθηκε διορθώνοντας τα σημεία ένα τη φορά και ακόμα και έτσι παρατηρήθηκε μείωση χρόνου ως και 80% σε σχέση με τον αλγόριθμο του Brühl, όπως φαίνεται στον Πίνακα 5. Η πρακτική που ακολουθούν οι Μπέκας και Γαλλόπουλος στην υλοποίηση του αλγορίθμου Cobra είναι να χρησιμοποιούν τόσους επεξεργαστές όσα και τα σημεία που προβλέπονται ανά βήμα. Έτσι, αποδείξαμε στην Παράγραφο 6.2 ότι η μέγιστη επιτάχυνση που μπορεί να επιφέρει ο Cobra είναι ίση με $m/2$, όπου m ο αριθμός των επεξεργαστών. Στον Πίνακα 6 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της εκτέλεσης του Cobra με χρήση παραλληλίας σε σχέση με τον αλγόριθμο του Brühl και πράγματι ο χρόνος εκτέλεσης είναι κάτι λιγότερο από 4 φορές μικρότερος, όταν χρησιμοποιούνται 8 επεξεργαστές.

Τέλος, μελετήσαμε τον αλγόριθμο Fast Descent ο οποίος επίσης εισάγει παραλληλισμό στην ιδέα του path-following, αλλά με διαφορετικό τρόπο από τον Cobra. Η ιδέα εδώ είναι παρόμοια με την εκμετάλλευση του παραλληλισμού στον GRID. Ο αλγόριθμος χρησιμοποιεί μια ήδη υπάρχουσα καμπύλη $\partial\Lambda_\varepsilon$ για κάποιο επίπεδο ε του ψευδοφάσματος και στη συνέχεια διορθώνει τα σημεία της όπως ακριβώς γίνεται η διόρθωση κάθε σημείου στο path-following, σε διεύθυνση κάθετη στην καμπύλη έτσι ώστε να υπολογιστεί ένα άλλο επίπεδο του ψευδοφάσματος $\partial\Lambda_\delta$, όπου $\delta < \varepsilon$ και επαγωγικά ο αλγόριθμος δεδομένου του $\partial\Lambda_\varepsilon$ υπολογίζει συνολικά M επίπεδα του ψευδοφάσματος, $\partial\Lambda_{\delta_i}$, $i=1, \dots, M$, όπου $\delta_1 < \delta_2 < \dots < \delta_M$ κάνοντας χρήση του $\partial\Lambda_{\delta_{i-1}}$ για τον υπολογισμό του $\partial\Lambda_{\delta_i}$. Ο υπολογισμός των σημείων κάθε καινούριας καμπύλης γίνεται ταυτόχρονα, χωρίζοντας τα σημεία σε παράλληλους επεξεργαστές. Ο τρόπος με τον οποίο μοιράζονται τα σημεία αναλύεται σύντομα στην Παράγραφο 7.2. Εκτός από τη μείωση του χρόνου εύρεσης πολλών επιπέδων του ψευδοφάσματος, ο Fast Descent λύνει και το πρόβλημα που παρουσιάζεται σε περιπτώσεις μη συνεκτικότητας αφού, όπως φαίνεται και στην Εικόνα 25, υπολογίζει όλες τις συνεκτικές συνιστώσες του ψευδοφάσματος που βρίσκονται εντός της αρχικής καμπύλης $\partial\Lambda_\varepsilon$. Όπως και στην περίπτωση του Cobra, εκτελέσαμε τον αλγόριθμο χρησιμοποιώντας έναν επεξεργαστή και στην περίπτωση ενός πίνακα Kahan μεγέθους 30, παρατηρήσαμε ότι ο χρόνος εκτέλεσης μειώνεται στο 1/3 για την εύρεση του ψευδοφάσματος για τις τιμές 0.1, 0.01 και 0.001, ακόμα κι αν σ' αυτό τον αλγόριθμο υπολογίζεται ο ίδιος αριθμός σημείων για κάθε τιμή του ε , ενώ οι άλλοι δύο path-following αλγόριθμοι μπορούν να υπολογίσουν διαφορετικό αριθμό ανά επίπεδο, αφού όσο μικραίνει το ε τόσο μειώνεται το μήκος του συνόρου του ψευδοφάσματος και άρα χρειάζεται να υπολογιστούν λιγότερα σημεία για την εύρεσή του. Τέλος, αναλύσαμε τον τρόπο με τον οποίο διορθώνεται το μειονέκτημα αυτό του αλγορίθμου Fast Descent και υπολογίζεται διαφορετικός αριθμός σημείων ανά επίπεδο στην Υποπαράγραφο 7.1.1, απορρίπτοντας σημεία τα οποία ήταν πολύ κοντά μεταξύ τους στην προηγούμενη καμπύλη.

9. Μελλοντικοί προβληματισμοί

Ως περαιτέρω μελέτη του θέματος εύρεσης του ψευδοφάσματος, μπορούμε, έχοντας τα κατάλληλα μέσα, να ασχοληθούμε με την υλοποίηση των αλγορίθμων που μελετήσαμε σε σύστημα παράλληλων επεξεργαστών και να ασχοληθούμε με τον ελάχιστο αριθμό επεξεργαστών που χρειάζονται για την ικανοποιητική μείωση του χρόνου εκτέλεσης κάθε αλγορίθμου, σε σχέση με το μέγεθος του εξεταζόμενου πίνακα καθώς και τη μορφή του. Θεωρούμε πως όσο πιο απλή και κοντά στην κανονικότητα είναι η μορφή ενός πίνακα, τόσο περισσότερος αριθμός επεξεργαστών θα χρειαστεί για την ικανοποιητική μείωση του χρόνου.

Όσον αφορά τον αλγόριθμο Inclusion-Exclusion, μια περαιτέρω ενασχόληση θα μπορούσε να περιέχει την μείωση των σημείων που εξετάζονται, έτσι ώστε να αποκλείονται και τα εσωτερικά σημεία του ψευδοφάσματος, αφού ο στόχος μας η εύρεση και απεικόνιση του συνόρου του. Βέβαια κάτι τέτοιο θα απέτρεπε την εκμετάλλευση του παραλληλισμού όπως αυτή αναλύεται στην Παράγραφο 4.1, αλλά θα ήταν ενδιαφέρον να διαπιστώσουμε κατά πόσο θα μειωνόταν ο αριθμός των σημείων σε κάθε περίπτωση.

Ένα ακόμα θέμα που παρουσίασε ιδιαίτερο ενδιαφέρον είναι το βήμα της πρόβλεψης τους αλγορίθμους path-following. Μια μελλοντική μελέτη θα μπορούσε να περιλαμβάνει τη μελέτη του συγκεκριμένου βήματος και αν αυτό μπορεί να είναι μεταβλητό σε κάθε επανάληψη για καθένα σημείο, ανάλογα με τη γεωμετρία της καμπύλης σε εκείνη την περιοχή. Αν κάτι τέτοιο αποδειχθεί εφικτό, τότε θα μπορούσαμε να ασχοληθούμε με τις παραμέτρους από τις οποίες θα εξαρτάται το t σε κάθε επανάληψη και αν αυτές μπορούν να υπολογιστούν με όσα δεδομένα έχει ο αλγόριθμος στη δεδομένη χρονική στιγμή, δηλαδή μόνο με τα προηγούμενα σημεία που βρίσκονται πάνω στην καμπύλη.

Βιβλιογραφία

- Bauer, F. L., & Fike, C. T. (1960). Norms and exclusion theorems. *Numerische Mathematik*, 2, 137–138.
- Bekas, C., & Gallopoulos, E. (2001). Cobra: Parallel path following for computing the matrix pseudospectrum. *Parallel Computing*, 27(14), 1879–1896.
- Bekas, C., & Gallopoulos, E. (2002). Parallel computation of pseudospectra by fast descent. *Parallel Computing*, 28(2), 223–242.
- Braconnier, T., McCoy, R. A., & Toumazou, V. (1997). Using the Field of Values for Pseudospectra Generation, (1), 1–14.
- Bruhl, M. (1996). A Curve Tracing Algorithm For Computing The Pseudospectrum, 3(October 1995), 441–454.
- Conway, J. B. (1978). *Functions of One Complex Variable*. New York: Springer-Verlag.
- Embree, M., & Trefethen, L. N. (n.d.). Pseudospectra Gateway.
- Embree, M., & Trefethen, L. N. (2000). Generalizing Eigenvalue Theorems to Pseudospectra Theorems, 23(2), 583–590.
- Gerschgorin, S. (1931). Über die Abgrenzung der Eigenwerte einer Matrix. *Bulletin de l'Académie Des Sciences de l'URSS. Classe Des Sciences Mathématiques et Na*, (6), 749–754.
- Golub, G. H., & Loan, C. F. V. (1996). *Matrix Computations. Book*. Baltimore: Johns Hopkins University Press.
- Koutis, I., & Gallopoulos, E. (2000). Exclusion regions and fast estimation of pseudospectra.
- Trefethen, L. N., & Embree, M. (2005). *Spectra and Pseudospectra: The Behavior of Nonnormal Matrices and Operators*. Princeton University Press.

Πίνακας Εικόνων

Εικόνα 1. Το ψευδοφάσμα, για διάφορες τιμές του ε , ενός πίνακα με διάσταση $n=200$ με στοιχεία από το $N(0,1/200)$. (Embree & Trefethen, n.d.)	11
Εικόνα 2: Η απόκλιση του ψευδοφάσματος από τέλειους κύκλους με κέντρα τις ιδιοτιμές ενός κανονικού πίνακα, όσο ο πίνακας αποκλίνει από την κανονικότητα.	16
Εικόνα 3. Το ορθογώνιο χωρίο της μεθόδου 1 και το κυκλικό της μεθόδου 2 και οι ιδιοτιμές ενός τυχαίου πίνακα 10×10	20
Εικόνα 4: Το ψευδοφάσμα του πίνακα A , όπως υπολογίστηκε από τον αλγόριθμο GRID καθώς και το χωρίο Ω για $\varepsilon = 1, 0.8, 0.5, 0.2, 0.005$	24
Εικόνα 5: Τα αποτελέσματα του αλγορίθμου GRID τους πίνακες Kahan (αριστερά) και Toeplitz (δεξιά) μεγέθους 100, για $\varepsilon = 0.1, 0.01, 0.001$ αντίστοιχα.	25
Εικόνα 6: Το ψευδοφάσμα του πίνακα Toeplitz μεγέθους 200 για τις διάφορες τιμές του ε	26
Εικόνα 7: Το ψευδοφάσμα του θετικού συμμετρικού πίνακα Toeplitz.	27
Εικόνα 8: Οι περιοχές αποκλεισμού και το Ω για τον πίνακα Kahan μεγέθους 100, και για $\varepsilon=0.1$ με βάση τον αλγόριθμο Standard IE.	35
Εικόνα 9: Απεικόνιση της προσέγγισης των περιοχών αποκλεισμού για το ψευδοφάσμα. (Μεγέθυνση Εικόνας 8)	36
Εικόνα 10: Οι περιοχές αποκλεισμού και το Ω για τον πίνακα Kahan μεγέθους 100, και για $\varepsilon=0.1$ με βάση τον αλγόριθμο Large IE.	36
Εικόνα 11: Αρχικά εσφαλμένες περιοχές αποκλεισμού.	37
Εικόνα 12: Οι περιοχές αποκλεισμού και το Ω για τον πίνακα Toeplitz μεγέθους 100, και για $\varepsilon=0.1$ με βάση τους αλγορίθμους Standard IE (αριστερά) και Large IE (δεξιά).	38
Εικόνα 13: Οι περιοχές αποκλεισμού για το ψευδοφάσμα του θετικού και συμμετρικού πίνακα Toeplitz.	39
Εικόνα 14: Τα βήματα 1 και 2 του αλγορίθμου. Η πρόβλεψη και διόρθωση του κάθε σημείου (Bruhl, 1996).	42
Εικόνα 15: Οι συνεκτικές συνιστώσες του ψευδοφάσματος του πίνακα A , ξεκινώντας από τη μικρότερη ιδιοτιμή, $\lambda=-0.1985$	46
Εικόνα 16: Όλες οι συνιστώσες του ψευδοφάσματος του A για $\varepsilon=0.5$ (πάνω αριστερά), $\varepsilon=0.2$ (πάνω δεξιά) και $\varepsilon=0.1$ (κάτω).	47
Εικόνα 17: Ολόκληρο το ψευδοφάσμα του A	48
Εικόνα 18: Μια συνεκτική συνιστώσα του ψευδοφάσματος των πινάκων Kahan (αριστερά) και Toeplitz (δεξιά) μεγέθους 100 για $\varepsilon = 0.1, 0.01, 0.001$	49

Εικόνα 19. Τα βήματα 2 και 3 του αλγορίθμου. Η πρόβλεψη και η διόρθωση των σημείων ζ_j	52
Εικόνα 20: Το ψευδοφάσμα του πίνακα Smoke μεγέθους 64, για $\varepsilon = 10^{-5}$, με χρήση του αλγορίθμου PF με βήμα $\tau = 0.025$ (αριστερά) και με χρήση του αλγορίθμου Cobra με $H = 0.06$ και $m = 8$ (δεξιά).	58
Εικόνα 21: Γραφική απεικόνιση της εκτέλεσης του αλγορίθμου FD σε έναν πίνακα Kahan μεγέθους 100. Τα βέλη δείχνουν την κατεύθυνση κατά την οποία υπολογίστηκαν οι εξωτερικές καμπύλες με τον αλγόριθμο PF καθώς και τη διεύθυνση διόρθωσης κάθε καμπύλης για τη δημιουργία της αμέσως επόμενης. Τα σημεία τομής των ευθειών είναι τα σημεία που υπολογίζει ο αλγόριθμος FD. (Bekas & Gallopoulos, 2002)	60
Εικόνα 22: Σχηματική απεικόνιση του αλγορίθμου Fast Descent. (Bekas & Gallopoulos, 2002)....	62
Εικόνα 23: Η διαδικασία αποκλεισμού των σημείων. (Bekas & Gallopoulos, 2002).....	64
Εικόνα 24: Το ψευδοφάσμα του πίνακα Kahan μεγέθους 100, για τις επιλεγμένες τιμές του ε χωρίς αποκλεισμό (επάνω) και με αποκλεισμό σημείων (κάτω). (Bekas & Gallopoulos, 2002).....	67
Εικόνα 25: Μέρος του ψευδοφάσματος του πίνακα Toerliz μεγέθους 50, για $\varepsilon = 10^{-3}, 10^{-5}, 10^{-6}$, όπως υπολογίστηκε	68
με τον αλγόριθμο Fast Descent. (Bekas & Gallopoulos, 2002).....	68

Πίνακας Πινάκων

Πίνακας 1: Ο αριθμός των σημείων που υπολογίζει η κάθε παραλλαγή του αλγορίθμου Inclusion-Exclusion.....	38
Πίνακας 2: Ο αριθμός επαναλήψεων της Newton-Raphson σε κάθε περίπτωση.....	48
Πίνακας 3: Ο αριθμός επαναλήψεων και σημείων για την εύρεση του Λ_ϵ του πίνακα Kahan.	49
Πίνακας 4: Ο αριθμός επαναλήψεων και σημείων για την εύρεση του Λ_ϵ του πίνακα Toeplitz.	49
Πίνακας 5: Σύγκριση του αριθμού σημείων και του χρόνου εκτέλεσης των αλγορίθμων PF και Cobra, για τους πίνακες Kahan και Toeplitz μεγέθους 30, για $\epsilon = 0.1$, $H = 0.064$ και $m = 8$	57
Πίνακας 6: Σύγκριση του χρόνου εκτέλεσης των αλγορίθμων PF και Cobra, για τους πίνακες Fish και Propeller για $\epsilon = 0.01$ και $p = m = 8$. (Bekas & Gallopoulos, 2001)	57
Πίνακας 7: Σύγκριση των δύο μεθόδων διαμοιρασμού των σημείων στην περίπτωση του παραλληλισμού και για έναν συγκεκριμένο πίνακα. (Bekas & Gallopoulos, 2002)	65
Πίνακας 8: Οι χρόνοι εκτέλεσης για τον υπολογισμό των καμπυλών της Εικόνας 24 με αποκλεισμό σημείων και οι αντίστοιχες επιταχύνσεις (σε παρένθεση). (Bekas & Gallopoulos, 2002).....	67