Επιστημονικός Υπολογισμός Ι

Ενότητα **7** : Διαχείρηση Μητρώων Ειδικής Δομής

Ευστράτιος Γαλλόπουλος
Τμήμα Μηχανικών Η/Υ & Πληροφορικής

Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.

Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Πατρών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο
ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ
ΕΣΠΑ 2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ
Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης

Σκοπός Ενότητας

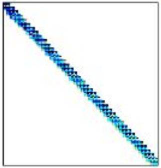
- Μητρώα ζώνης
- Αραιά μητρώα
- Βιβλιοθήκη LAPACK
- Στοιχεία επαναληπτικών μεθόδων για την επίλυση γραμμικών συστημάτων

Περιεχόμενα

Μητρώα ζώνης Ι

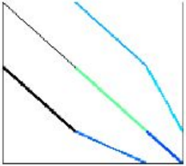
Ορισμός

Αν σε ένα μητρώο αριθμήσουμε τις υπερδιαγωνίους, $1, 2, ..., n-1$ και τις υποδιαγωνίους $1, 2, ..., m-1$, τότε μητρώα ζώνης (banded matrices) ονομάζονται τα μητρώο που έχουν μόνο μηδενικά από μια υπερδιαγώνιο και άνω ή/και από μία υποδιαγώνιο και κάτω.

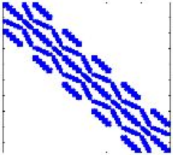


HB/man n=5976
nnz=225046

Kim1, n=38415
nnz=933195



Bindel ted_AB, n=10605
nnz=522387



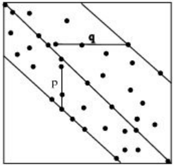
Wathen, n=96
nnz=1256

Μητρώα ζώνης II

- Αλγόριθμοι διαχείρισης τριδιαγώνιων μητρώων με $O(n)$ πράξεις α.κ.υ.
- Αλγόριθμοι διαχείρισης μητρώων ζώνης (banded matrices) με $O(nb)$ πράξεις α.κ.υ. όπου το b εξαρτάται από το «εύρος της ζώνης».
- Στοιχεία γενικών αραιών μητρώων (αποθήκευση)

Παρατήρηση: Η διαχείριση μητρώων με ειδική δομή είναι σημαντική, γιατί:

1. Στις εφαρμογές πολύ συχνά προκύπτουν τέτοια μητρώα,
2. Έχουν μειωμένο κόστος διαχείρισης σε σύγκριση με τα γενικά μητρώα,
3. ... επομένως πολλοί αλγόριθμοι (π.χ. εύρεσης ιδιοτιμών, ιδιαζουσών τιμών) ανάγουν πρώτα το μητρώο σε τέτοια μορφή.



- Αν όλα τα στοιχεία άνω της υπερδιαγωνίου q και όλα τα στοιχεία κάτω της υποδιαγωνίου p είναι 0 τότε λέμε ότι το μητρώο έχει εύρος ζώνης (bandwidth) $p+q+1$. Επομένως $\alpha_{ij}=0$ αν $j>i+q$ ή $i>j+p$.
- Εμφανίζονται σε πάρα πολλές περιστάσεις! Η παρουσία `κοντινών' στοιχείων σχετίζεται με την `τοπικότητα' πολλών δράσεων.
- .... μερικές φορές τα μητρώα είναι `σχεδόν' μητρώα ζώνης, χονδρικά το $\frac{\|A-A(p|q)\|}{\|A\|}$ είναι μικρό,
- (συμβολισμός: $A(p|q)$ για μητρώο ζώνης με p κάτω q άνω q διαγωνίους ή για το τμήμα αυτό δεδομένου A)

Παρατηρήσεις

Τα μητρώα για τα οποία το πλήθος των μη μηδενικών $\mathrm{nnz} = \mathrm{O}(n)$ λέγονται **αραιά**.

- Υπάρχουν διάφοροι τρόποι αναπαράστασής τους (αραιές αναπαραστάσεις) με ειδικές δομές που επιτρέπουν την αποθήκευσή τους σε χώρο μικρότερο του $O(mn)$.
- ... τότε οι πράξεις με αυτά πρέπει να γράφονται με τρόπο που να λαμβάνει υπόψη την αραιή δομή.
- Αν επιτελέσουμε μία πράξη μεταξύ δύο μητρώων, το αποτέλεσμα μπορεί να είναι αραιό ή όχι. Π.χ. αν $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ τριδιαγώνιο τότε το A^{n-1} θα είναι πυκνό.

ΠΡΟΣΟΧΗ - 1) Το αντίστροφο αραιού μητρώου δεν είναι αραιό!

ΠΡΟΣΟΧΗ - 2) Αν $PA = LU$, οι παράγοντες L, U μπορεί να έχουν περισσότερα μη μηδενικά από τον A.

```
A=toeplitz(single([4,-1,zeros(1,4)]))
A =
     4    -1     0     0     0     0
    -1     4    -1     0     0     0
     0    -1     4    -1     0     0
     0     0    -1     4    -1     0
     0     0     0    -1     4    -1
     0     0     0     0    -1     4
inv(A)
ans =
0.2679    0.0718    0.0192    0.0052    0.0014    0.0003
0.0718    0.2872    0.0769    0.0206    0.0055    0.0014
0.0192    0.0769    0.2886    0.0773    0.0206    0.0052
0.0052    0.0206    0.0773    0.2886    0.0769    0.0192
0.0014    0.0055    0.0206    0.0769    0.2872    0.0718
0.0003    0.0014    0.0052    0.0192    0.0718    0.2679
```

ούτε αραιό ούτε Toeplitz

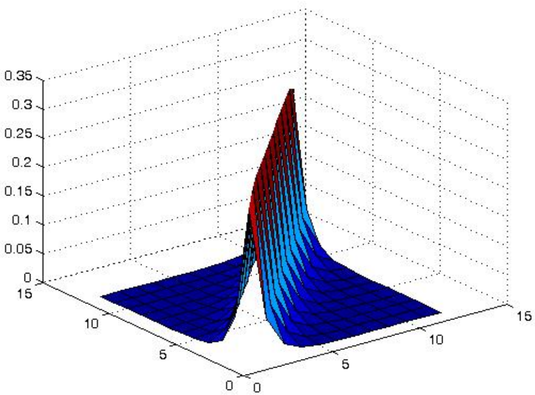
ένας ακόμα λόγος να μην αντιστρέφουμε!

Ενδιαφέρουσα δομή

Μπορεί το μητρώο να είναι `σχεδόν' ζώνης

```
A=inv(toeplitz([4,-1,zeros(1,10)]));
A(1:end,1:2)
ans =
      2.679491924311180e-001    7.179676972447216e-002
      7.179676972447216e-002    2.871870788978886e-001
      1.923788646677060e-002    7.695154586708242e-002
      5.154776142610260e-003    2.061910457044104e-002
      1.381218103670437e-003    5.524872414681748e-003
      3.700962720714876e-004    1.480385088285951e-003
      9.916698461551368e-005    3.966679384620547e-004
      2.657166639056713e-005    1.062866655622685e-004
      7.119680946754830e-006    2.847872378701932e-005
      1.907057396452187e-006    7.628229585808746e-006
      5.085486390539163e-007    2.034194556215665e-006
      1.271371597634791e-007    5.085486390539163e-007
```

Οπτικοποίηση μεγεθών



ΓΙΑΤΙ; ΔΚ του A συνεπάγεται φθίνουσα συμπεριφορά του A^{-1} καθώς απομακρυνόμαστα από την κύρια διαγώνιο

Παραγοντοποίηση μητρώου ζώνης

Θεώρημα

Έστω $A(p|q) \in \mathbb{R}^{n\times n}$ το οποίο επιδέχεται παραγοντοποίησης $A = LU$. Τότε L έχει κάτω εύρος p και U άνω εύρος p, δηλ. $A(p|q) = L(p|0)U(0|q)$.

Άρα

- *αν δεν χρειάζεται οδήγηση,* οι παράγοντες θα έχουν το ίδιο (αντίστοιχο) εύρος ζώνης
- οι παράγοντες L, U μπορούν να αποθηκευθούν στον ίδιο χώρο που καταλαμβάνει ο A. Ο αλγόριθμος παραγοντοποίησης μπορεί και αυτός να εκμεταλλευτεί τη μηδενική δομή με αποτέλεσμα τη ελάττωση των πράξεων.

Παραγοντοποίηση μητρώου ζώνης

Είσοδος: Μητρώο ζώνης $A(p|q)$. *Έξοδος:* Παράγοντες $L(p|0), U(0|q)$ αποθηκευμένοι στα κάτω και άνω τριγωνικά τμήματα του A. *Κόστος:* $\Omega \approx 2npq$ όταν $n \gg q$.

for $k = 1 : n-1$
  for $i = k+1 : \min(k+p, n)$
    $\alpha_{ik} = \alpha_{ik}/\alpha_{kk}$
  end
  for $j = k+1 : \min(k+q, n)$
    for $i = k+1 : \min(k+p, n)$
      $\alpha_{ij} = \alpha_{ij} - \alpha_{ik}\alpha_{kj}$
    end
  end
end

Σε τριδιαγώνια μητρώα: Αν δεν χρειάζεται οδήγηση, $A(1|1) = L(1|0)U(0|1)$.

$$\begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \gamma_2 & \ddots & \ddots & \\ \ddots & \ddots & & \beta_{n-1} \\ & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & & \\ \lambda_2 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & \lambda_n & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 & \beta_1 & & \\ 0 & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & \beta_{n-1} \\ & & 0 & \eta_n \end{pmatrix}$$

Διάσπαση *LU* τριδιαγώνιου συστήματος

χωρίς οδήγηση

```
function [L,U] = lutx_trid(A); %(EG)
% tropopoihm'eno LU gia tridiag'wnia
% QWRIS od'hghsh - sto t'eloc L*U = A;
[n,n] = size(A);
for k = 1:n-1
      % Compute multipliers
            A(k+1,k) = A(k+1,k)/A(k,k);
% anti gia A(k+1•n,k) = A(k+1:n,k)/A(k,k);
      % Update the remainder of the matrix
            A(k+1,k+1) = A(k+1,k+1) - A(k+1,k)*A(k,k+1);
% ant'i gia A(k+1:n,k+1:n) = A(k+1:n,k+1:n) - ...
    A(k+1:n,k)*A(k,k+1:n);
end
L = tril(A,-1) + eye(n,n); U = triu(A);
```

Αν εφαρμόσουμε οδήγηση, η δομή μπορεί να επηρεαστεί με εμφάνιση περισσότερων μη μηδενικών (γέμισμα - fill-in)

Επρός και πίσω αντικατάσταση

```
function x = tr_forward(L,x) %NCM software
% Forward elimination gia k'atw didiag'wnio L
[n,n] = size(L);
x(1) = x(1)/L(1,1);
for k = 2:n
    x(k) = (x(k) - L(k,k-1)*x(k-1))/L(k,k);
end
function x = tr_backsubs(U,x)
% Back substitution. Gia 'anw didiag'wnio U
[n,n] = size(U);
x(n) = x(n)/U(n,n);
for k = n-1:-1:1
    x(k) = (x(k) - U(k,k+1)*x(k+1))/U(k,k);
end
```

1. Για παραγοντοποίηση $\Omega = 3n + O(1)$
2. Για επίλυση, επιπλέον $\Omega = 5n + O(1)$ (λαμβάνοντας υπόψη ότι `L(k,k)=1`.

Πώς επιδρά η οδήγηση;

Αν είναι απαραίτητη η μερική οδήγηση για «ασφαλή» παραγοντοποίηση:

Θεώρημα

Έστω $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ αντιστρέψιμο και $A = A(p|q)$ και ότι χρησιμοποιείται απαλοιφή Gauss με μερική οδήγηση για τον υπολογισμό της παραγοντοποίησης $PA = LU$. Τότε το άνω τριγωνικό μητρώο U έχει ημιεύρος $p+q$ και το κάτω τριγωνικό μητρώο L έχει κατά μέγιστο $p+1$ μη μηδενικά στοιχεία ανά στήλη.

Επομένως: Εφόσον για τον A χρειαζόμαστε περίπου $(p+q+1)n$ στοιχεία όταν $p, q \ll n$:

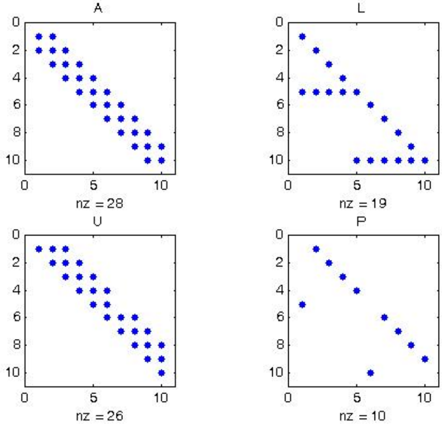
χωρίς οδήγηση $A(p|q) = L(p|0)U(0|q)$ και τα L, U μπορούν να αποθηκευτούν στο A

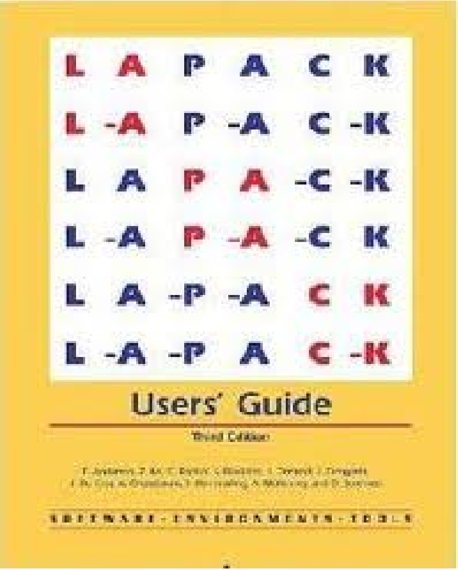
με οδήγηση $PA(p|q) = L(?|0)U(0|p+q)$ και χρειάζονται περίπου pn επιπλέον θέσεις αποθήκευσης.

Δηλαδή: Μπορεί να χρειαστεί επιπρόσθετος χώρος από αυτόν που έχουμε για τον A ... αλλά όχι πάρα πολύς!

Παράδειγμα

Οδήγηση οδηγεί σε αλλαγή της δομής των παραγόντων και `γέμισμα΄





Περίπου 996.000 αποτελέσματα (0,24 δευτερόλεπτα)

[LAPACK — Linear Algebra PACKage - Netlib]
www.netlib.org/**lapack**/ ▾ Μετάφραση αυτής της σελίδας
Fortran 77 routines for solving systems of simultaneous linear equations, least-squares solutions of linear systems of equations, eigenvalue problems, and ...
LAPACK Users' Guide -- Third ... - LAPACKE C Interface - Lapack 3.4.2 - Lawn81
Έχετε επισκεφτεί αυτή τη σελίδα πολλές φορές. Τελευταία επίσκεψη: 3/6/2013

[LAPACK - Wikipedia, the free encyclopedia]
en.wikipedia.org/wiki/**LAPACK** ▾ Μετάφραση αυτής της σελίδας
LAPACK (Linear Algebra Package) is a software library for numerical linear algebra. It provides routines for solving systems of linear equations and linear least ...
LAPACK++ - ScaLAPACK - PLAPACK

[MATLAB Incorporates LAPACK - MathWorks]
www.mathworks.com/.../matlab-incorporat... ▾ Μετάφραση αυτής της σελίδας
Increasing the speed and capabilities of matrix computation.

[LAPACK]
www.cs.colorado.edu/~jessup/**lapack**/ ▾ Μετάφραση αυτής της σελίδας
LAPACK provides routines for solving systems of simultaneous linear equations, least-squares solutions of linear systems of equations, eigenvalue problems, ...

[LAPACK for Windows - Innovative Computing Laboratory]
icl.cs.utk.edu/**lapack**-for-windows/ ▾ Μετάφραση αυτής της σελίδας
The **LAPACK** community has decided to extend its support to Microsoft Windows based users. The decision was taken due to the large amount of requests we ...

Βιβλιοθήκη LAPACK

Η σημαντικότερη βιβλιοθήκη προγραμμάτων αιχμής για την επίλυση των θεμελιωδών προβλημάτων γραμμικής άλγεβρας LAPACK (ABB+99). Πολλά περιβάλλοντα του ΕΥ στηρίζονται σ΄ αυτήν (MATLAB, Octave, Scilab) ενώ μερικές ρουτίνες της χρησιμοποιούνται ως μετροπρόγραμμα για την αξιολόγηση επίδοσης υπολογιστικών συστημάτων. Το εγχειρίδιο της LAPACK είναι βασική πηγή του ΕΥ.

✓ Με την LAPACK λύνονται συστήματα γραμμικών εξισώσεων (ΑΓΑ.1), γραμμικά προβλήματα ελαχίστων τετραγώνων, προβλήματα ιδιοτιμών, και προβλήματα ιδιαζουσών τιμών. Η LAPACK εκτελεί πολλούς συναφείς υπολογισμούς, όπως παραγοντοποιήσεις μητρώων και εκτίμηση δεικτών κατάστασης.

✓ Παρέχονται ρουτίνες για υπολογισμούς με πυκνά μητρώα και μητρώα ζώνης αλλά όχι για γενικά αραιά μητρώα. Επίσης υπάρχει η δυνατότητα για υπολογισμούς με πραγματική ή μιγαδική α.κ.υ.

✓ Περισσότερες από 800,000 γραμμές κώδικα+σχόλια Fortran.

✓ LAPACKe εκδοχή C, παράδειγμα ονοματολογίας LAPACKE_dgetrf

✓ http://www.netlib.org/lapack/lawnspdf/lawn270.pdf: LAPACK σε Visual Studio

- ✓ Η πιο πρόσφατη εκδοχή LAPACK 3.5.0 (11/2013).
- ✓ Αποτελείται από ρουτίνες οδηγούς (drivers) για την επίλυση των βασικών προβλημάτων, υπολογιστικές ρουτίνες με πιο εξειδικευμένο στόχο, και βοηθητικές ρουτίνες για υπολογισμούς χαμηλοτέρου επιπέδου. Οι οδηγοί καλούν μια σειρά από υπολογιστικές ρουτίνες. Οι υπολογιστικές ρουτίνες φέρουν σε πέρας ένα ευρύτερο φάσμα υπολογισμών από αυτό που αναφέρεται στους οδηγούς. Οι βοηθητικές ρουτίνες είναι χρήσιμες για πολλές άλλες εφαρμογές.
- ✓ Το αρχείο διανομής περιέχει τον κώδικα πηγής (Fortran), προγράμματα ελέγχου, και προγράμματα για την εκτίμηση της απόδοσής τους στο υπολογιστικό σύστημα που χρησιμοποιείται.
- ✓ Το αρχείο διανομής περιέχει κώδικες αναφοράς για τα BLAS επιπέδων 1, 2 και 3. Πρέπει όμως να σημειωθεί ότι οι κώδικες αυτοί πρέπει να χρησιμοποιούνται μόνον αν δεν υπάρχει εναλλακτική, πιο αποδοτική, υλοποίηση για το υπολογιστικό σας σύστημα (πράγμα σπάνιο)! Μην ξεχνάτε ότι η απόδοση της LAPACK καθορίζεται σε μεγάλο βαθμό από την απόδοση των BLAS, επομένως είναι κρίσιμο να βρείτε και να εγκαταστήσετε αποδοτικούς κώδικες για τα BLAS αντί για τους κώδικες αναφοράς. Τα BLAS δεν είναι μέρος της LAPACK.
- ✓ Η LAPACK στη MATLAB, στην Intel MKL, στην IBM SSL, στην NVIDIA.

Χαρακτηριστικά

Προσοχή:

- Σχετικά με την ακρίβεια: επιστρέφονται δείκτες που πληροφορούν το χρήστη για την αξιοπιστία των αποτελεσμάτων (π.χ. δείκτες κατάστασης, εμπρός σφάλμα, πίσω σφάλμα, κ.ά.)
- Σχετικά με αποτελεσματικότητα και ταχύτητα: Χρήση BLAS-3, αξιοποίηση δομής για φθηνότερη αποθήκευση, κ.ά.

Ειδικότερα σχετικά με το τελευταίο:

Ανάλογα με το είδος του μητρώου, μπορεί να χρησιμοποιηθεί και δομή αποθήκευσης που αξιοποιεί τα συγκεκριμένα χαρακτηριστικά. Ειδικότερα:

Για τετραγωνικό μητρώο $n \times n$:

γενική δομή: συνηθισμένη αποθήκευση σε διδιάστατο πίνακα $n \times n$

συμμετρική, ερμιτιανή ή τριγωνική δομή: στιβαγμένη αποθήκευση ανά στήλη

δομή ζώνης: αποθήκευση ζώνης

τριδιαγώνια ή διδιαγώνια δομή: αποθήκευση σε 2 ή 3 *μονοδιάστατους* πίνακες

Ονοματολογία και δομές αναπαράστασης LAPACK

Τα ονόματα έχουν τη μορφή SYYZZZ όπου S δηλώνει τον αριθμητικό τύπο των δεδομένων και της αριθμητικής που θα ακολουθηθεί, YY το είδος του μητρώου και τον τρόπο αποθήκευσής του, ZZZ την πράξη που εκτελείται.

X	*τύπος στοιχείων*	ZZZ	*υπολογισμός*
S	REAL	TRF	παραγοντοποίηση
D	DOUBLE PRECISION	TRS	επίλυση από παραγοντοποίηση
C	COMPLEX	COND	εκτίμηση δείκτη κατάστασης
Z	COMPLEX*16	RFS	refine επίλυση
		TRI	αντιστροφή από παραγοντοποίηση
		EQU	κλιμάκωση

YY	*είδος μητρώου → δομή πίνακα*	YY	*είδος μητρώου → δομή πίνακα*
GE	γενικός	PO	συμ. (Ερμιτιανός) θετ. ορισμ.
TR	τριγωνικός	PP	στιβαγμένος συμμ. (Ερμιτιανός) θετ. ορισμ
TB	τριγωνικός ζώνης	PB	συμμ. (Ερμιτιανός) θετι. ορισμ. ζώνης
TP	στιβαγμένος τριγωνικός	PT	συμμ. (Ερμιτιανός) θετ. ορισμ. τριδιαγώνιο
GB	γενικός ταινιακός	SY	συμμ. (μιγ.) αόριστος
GT	γενικός τριδιαγώνιος	SP	στιβαγμένος συμμ. (μιγ.) αόριστος
HE	Ερμιτιανός αόριστος		

Για παράδειγμα, η ανά στήλη στιβαγμένη αποθήκευση ενός κάτω τριγωνικού μητρώου A είναι όπως στο AP.

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} \alpha_{11} & 0 & 0 & 0 \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & 0 & 0 \\ \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & 0 \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} \end{pmatrix} \\ AP &= [\alpha_{11}, \alpha_{21}, \alpha_{31}, \alpha_{41}, \alpha_{22}, \alpha_{32}, \alpha_{42}, \alpha_{33}, \alpha_{43}, \alpha_{44}] \end{aligned}$$

Για περισσότερες πληροφορίες δείτε

http://www.netlib.org/lapack/lug/node121.html

Ρουτίνες

Παρέχονται δύο τύποι οδηγών για γραμμικά συστήματα:

1. απλός οδηγός (επίθεμα ονόματος $-\mathrm{SV}$), που λύνει το $AX = B$ μέσω παραγοντοποίησης του A και εγγραφής της λύσης X επί του B.
2. έμπειρος οδηγός (επίθεμα ονόματος $-\mathrm{SVX}$), που επιπλέον υπολογίζει τα εξής (μερικά προαιρετικά): επίλυση $A^\top X = B$ ή $A^* X = B$ (εκτός αν το A είναι συμμετρικό ή ερμιτιανό)· εκτίμηση δείκτη κατάστασης του A, έλεγχος αν το μητρώο είναι σχεδόν μη αντιστρέψιμο (μοναδικό), έλεγχος μεγέθυνσης του παράγοντα οδήγησης· εκλέπτυνση της λύσης και υπολογισμός φραγμάτων για το εμπρός και πίσω σφάλμα· ζυγοστάθμιση του A αν έχει διαπιστωθεί κακή κλιμάκωση.

Οι έμπειροι οδηγοί χρειάζονται περί το διπλάσιο χώρο αποθήκευσης και επιπλέον χρόνο. Αμφότεροι οδηγοί μπορούν να λύσουν για πολλά δεξιά μέλη (δηλ. B πολλών στηλών). Οι οδηγοί διαφέρουν ανάλογα με το είδος του τύπου (αποθήκευσης) του A.

DGESV `driver` για την επίλυση γενικού πραγματικού συστήματος σε αριθμητική διπλής ακρίβειας.

DGESVX `expert driver` για το παραπάνω

DGECON εκτίμηση του αντιστρόφου του δείκτη κατάστασης γενικού πραγματικού μητρώου ως προς την νόρμα 1 ή τη νόρμα μεγίστου χρησιμοποιώντας την *LU* παραγοντοποίηση που προκύπτει από τη ρουτίνα DGETRF.

Η αντιστροφή μητρώων επιτελείται μέσω των υπολογιστικών ρουτινών (και όχι των ρουτινών οδήγησης).

LAPACK για QR και ελάχιστα τετράγωνα

Για QR: Όταν ο A είναι «πλήρους τάξεως» χρησιμοποιείται η ρουτίνα _GEQRF που υπολογίζει κατά πλοκάδες QR.

- Ο Q αναπαρασταίνεται σαν γινόμενο στοιχειωδών ανακλαστών και δεν σχηματίζεται άμεσα.
- Η ρουτίνα _ORGQR (_ORMQR) υλοποιούν πολλαπλασιασμό από τα αριστερά (δεξιά) του Q ή $Q^\top$ με μητρώο A.

Για το ΑΓΑ.2:

με QR η LQ	_GELS
με πλήρη ορθογώνια παραγοντοποίηση	_GELSU
με διάσπαση SVD	_GELSS

Στις _GELSU, _GELSS δεν απαιτείται πλήρης τάξη από τον A.

Βιβλιογραφία I

E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammerling, A. McKenney, and D. Sorensen.
LAPACK Users´ Guide.
SIAM, Philadelphia, third edition, 1999.

Ε. Γαλλόπουλος.
Επιστημονικός Υπολογισμός I.
Πανεπιστήμιο Πατρών, 2008.

Χρήση Έργου Τρίτων I

1. NCM software (βλ. σελ 15)
2. http://www.math.kent.edu/ gartland/lug-cover2.jpg (βλ. σελ 19)
3. https://www.google.gr (βλ. σελ 19)
4. Intel MKL (βλ. σελ 21)
5. IBM SSL (βλ. σελ 21)
6. NVIDIA (βλ. σελ 21)
7. http://www.netlib.org/lapack/ (βλ. σελ 20-23)

Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Πανεπιστήμιο Πατρών - Ευστράτιος Γαλλόπουλος 2015

``Επιστημονικός Υπολογισμός Ι'', Έκδοση: 1.0, Πάτρα 2013-2014.
Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: https://eclass.upatras.gr/courses/CEID1096/

Τέλος Ενότητας

BY NC ND

Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο

ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

ΕΣΠΑ 2007-2013
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης