Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση

Τμήμα Μηχανικών Η/Υ και Πληροφορικής Πανεπιστημίου Ιωαννίνων

ΕΕ 2017–2018

Διαδικαστικά Θέματα

Διάρκεια μαθημάτων: Από τη Δευτέρα, 12–2–2018, μέχρι την Πέμπτη, 31–5–2018.

- 4 ώρες Θεωρία (Τρίτη και Πέμπτη: 10–12) [και Παρασκευή: 10–11]
- 1 ώρα Ασκήσεις (Παρασκευή: 11–12)

  Την πρώτη ώρα της Παρασκευής, δηλαδή 10–11, θα γίνει μάθημα μόνο έξι φορές στη διάρκεια του εξαμήνου. Ο λόγος είναι ότι την Πέμπτη και την Παρασκευή, 22 και 23 Φεβρουαρίου, και την Πέμπτη και την Παρασκευή, 10 και 11 Μαΐου, δεν θα γίνει μάθημα γιατί θα απουσιάζω.
- Θα υπάρξουν 2–3 εργαστηριακές ασκήσεις (σε Fortran ή Matlab)

  Βοηθοί: Δεν έχουν οριστεί ακόμα.
- Εργαστηριακές ασκήσεις: ένας επί πλέον βαθμός

  Θεωρία: 100% του βαθμού
- Εξετάσεις: Με κλειστά βιβλία, χωρίς σημειώσεις.
- Βιβλία
  - Γ. Δ. Ακρίβης, Β. Α. Δουγαλής: *Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση*. Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης. Ηράκλειο, τέταρτη έκδοση, 2010, πέμπτη ανατύπωση, 2017.
  - Μ. Ν. Βραχάτης: *Αριθμητική Ανάλυση*: *Εισαγωγή*. Εκδόσεις Κλειδάριθμος. Αθήνα, 2011.

Το περιεχόμενο του μαθήματος εν συντομία

1. *Αριθμητική κινητής υποδιαστολής – Σφάλματα στρογγύλευσης*

Οι πράξεις στους υπολογιστές γίνονται με πεπερασμένη ακρίβεια και επομένως εμφανίζονται σφάλματα στρογγύλευσης. Θα εξετάσουμε ορισμένα βασικά θέματα που σχετίζονται με αυτό το γεγονός και θα μιλήσουμε για την ευαισθησία τόσο προβλημάτων όσο και αλγορίθμων σε σφάλματα στρογγύλευσης.

2. *Μη γραμμικές εξισώσεις*

Έστω $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ μια συνάρτηση. Θα μελετήσουμε αριθμητικές μεθόδους προσέγγισης ριζών της f.

3. *Γραμμικά συστήματα*

Έστω A ένας $n \times n$ πίνακας και $b \in \mathbb{R}^n$. Το πρόβλημα της επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος της μορφής

$$Ax = b$$

εμφανίζεται πολύ συχνά στις εφαρμογές, συνήθως ως μέρος ενός πολυπλοκώτερου προβλήματος. Δεν είναι όλες οι μέθοδοι που ξέρουμε από τη Γραμμική Άλγεβρα κατάλληλες για την επίλυση γραμμικών συστημάτων με υπολογιστές. Εδώ θα μελετήσουμε αριθμητικές μεθόδους για την επίλυση τέτοιων προβλημάτων.

Πολλές φορές χρειάζεται να λύσουμε γραμμικά συστήματα με μερικές χιλιάδες εξισώσεις. Αυτό απαιτεί συνήθως κλάσματα του δευτερολέπτου. Αν χρησιμοποιήσει κανείς τη μέθοδο του Cramer και κάνει όλες τις πράξεις για τον υπολογισμό των οριζουσών όπως εμφανίζονται στα αναπτύγματα οριζουσών, τότε για $n = 20$ απαιτούνται αιώνες για τους υπολογισμούς!

4. *Παρεμβολή*

Όταν θέλουμε να υπολογίσουμε την τιμή μιας συνάρτησης, π.χ. του ημιτόνου, σε ένα σημείο με έναν υπολογιστή, ο υπολογιστής συνήθως μας δίνει την τιμή μιας άλλης, απλούστερης, συνάρτησης στο συγκεκριμένο σημείο, και αυτή η απλή συνάρτηση προσεγγίζει την αρχική. Ένας τρόπος προσέγγισης συναρτήσεων είναι η παρεμβολή. Η παρεμβολή, στην απλούστερή της μορφή, συνίσταται στον προσδιορισμό μιας συνάρτησης, από ένα συγκεκριμένο σύνολο, το γράφημα της οποίας διέρχεται από κάποια συγκεκριμένα σημεία (x_i, y_i), $i = 1, \dots, n$.

5. *Αριθμητική ολοκλήρωση*

Συχνά θέλουμε να υπολογίσουμε ολοκληρώματα της μορφής

$$\int_a^b f(x)dx.$$

Πολλές φορές δεν είναι γνωστή μια παράγουσα F της f, αλλά και όταν ακόμη αυτό συμβαίνει, είναι δυνατόν να μην προσφέρεται ο υπολογισμός της διαφοράς $F(b)-F(a)$ γιατί η F μπορεί να είναι πολύπλοκη συνάρτηση ενώ η f απλή. Έτσι καταφεύγουμε στην προσέγγιση του

$$\int_a^b f(x)dx$$

με αθροίσματα της μορφής

$$\sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

με κατάλληλα βάρη w_i και κατάλληλους κόμβους x_i.

1. Αριθμητική κινητής υποδιαστολής – Σφάλματα στρογγύλευσης

Τα αποτελέσματα επιστημονικών υπολογισμών που γίνονται με υπολογιστή πρέπει να αντιμετωπίζονται με κριτική διάθεση. Όταν χρησιμοποιούμε *καλές* μεθόδους, οι υπολογιστές μας δίνουν *καλά* αποτελέσματα, όταν χρησιμοποιούμε κακές μεθόδους, οι υπολογιστές μας δίνουν άσχημα αποτελέσματα.

Ο υπολογιστής είναι ένα *εργαλείο*, όπως π.χ. το αυτοκίνητο. Όπως όλα τα εργαλεία, έτσι και οι υπολογιστές μπορούν να χρησιμοποιηθούν και με *καλό* και με *άσχημο* τρόπο.

Η *ποιότητα* μιας αριθμητικής μεθόδου καθορίζεται από τρία πράγματα: Την *απαιτούμενη μνήμη* και τον *απαιτούμενο χρόνο* για την υλοποίησή της, και, κυρίως, από την *ακρίβεια των αποτελεσμάτων*. Η απαιτούμενη μνήμη και ο απαιτούμενος χρόνος έχουν *σχετική* αξία, ο ρόλος που παίζουν εξαρτάται από τη συγκεκριμένη εφαρμογή. Κάποια ακρίβεια των αποτελεσμάτων απαιτείται πάντα.

Οι πράξεις στους υπολογιστές γίνονται με *πεπερασμένη ακρίβεια*. Αυτό έχει ως συνέπεια *σφάλματα στρογγύλευσης*, τα οποία μερικές φορές αλλοιώνουν τα αποτελέσματα επιστημονικών υπολογισμών. Ας δούμε δύο παραδείγματα:

$1^{\underline{o}}$ Παράδειγμα. Ενδιαφερόμαστε να υπολογίσουμε το ολοκλήρωμα

$$I_n := \int_0^1 x^n \mathrm{e}^{x-1}\, dx, \quad n \in \mathbb{N},$$

για αρκετά μεγάλο n. Κατ' αρχάς, ας δούμε μερικές ιδιότητες των I_n. Προφανώς, $x^{n+1} < x^n$ για $0 < x < 1$, οπότε

$$0 < I_{n+1} < I_n \leqslant \int_0^1 x^n dx = \frac{1}{n+1}\,,$$

δηλαδή η ακολουθία $(I_n)_{n\in\mathbb{N}}$ είναι γνησίως φθίνουσα και μηδενική.

Τώρα

$$I_n = \int_0^1 x^n \big(\mathrm{e}^{x-1}\big)'\, dx = \big[x^n \mathrm{e}^{x-1}\big]_{x=0}^{x=1} - n\int_0^1 x^{n-1}\mathrm{e}^{x-1}\, dx,$$

συνεπώς

$$\begin{cases} I_n = 1 - nI_{n-1}, \quad n \geqslant 2, \\ I_1 = \dfrac{1}{\mathrm{e}}. \end{cases}$$

Αυτή είναι μια *ασταθής* μέθοδος.

Αιτιολόγηση της αστάθειας

Υποθέτουμε ότι αντί της ακριβούς αρχικής τιμής I_1, ξεκινάμε τον αλγόριθμο με μια προσέγγισή της $\widetilde{I}_1, \widetilde{I}_1 \neq I_1$, και στη συνέχεια εκτελούμε τις πράξεις *ακριβώς*, δηλαδή χωρίς να υπεισέρχονται νέα σφάλματα. Τότε θα έχουμε $\widetilde{I}_n = 1 - n\widetilde{I}_{n-1}$, οπότε, αφαιρώντας από την αντίστοιχη σχέση που ικανοποιούν τα I_n, παίρνουμε

$$I_n - \widetilde{I}_n = -n(I_{n-1} - \widetilde{I}_{n-1}).$$

Παρατηρήστε ότι το σφάλμα $I_{n-1} - \widetilde{I}_{n-1}$ πολλαπλασιάζεται στο βήμα n επί $-n$. Μάλιστα, όπως διαπιστώνει κανείς επαγωγικά, η ανωτέρω σχέση δίνει

$$I_n - \widetilde{I}_n = (-1)^{n-1} n!(I_1 - \widetilde{I}_1).$$

Πράγματι, αυτή η σχέση είναι σωστή για $n = 1$ και, υποθέτοντας ότι ισχύει για n, διαπιστώνουμε αμέσως ότι ισχύει και για $n + 1$.

Συμπεραίνουμε έτσι ότι

$$|I_n - \widetilde{I}_n| = n!|I_1 - \widetilde{I}_1|, \quad n = 1, 2, \dots .$$

Όμως, το $n!$ αυξάνει ταχύτατα με το n, και επομένως ο αλγόριθμος είναι όντως ασταθής, αφού ένα μικρό αρχικό σφάλμα $|I_1 - \widetilde{I}_1|$ οδηγεί σε ένα μεγάλο σφάλμα $|I_n - \widetilde{I}_n|$.

Ασταθής Αλγόριθμος (απλή ακρίβεια)

$$I_n = 1 - n\,I_{n-1}$$

n	$\widetilde{I}_n$
1	0.367879
2	0.264242
3	0.207274
4	0.170904
5	0.145480
6	0.127120
7	0.110160
8	0.118720 ;
9	−0.068480 ; !

$$\varepsilon_n = \widetilde{I}_n - I_n, \qquad \varepsilon_n = (-1)^{n-1}\, n!\, \varepsilon_1$$

$$\varepsilon_1 \approx -4.4 \cdot 10^{-7}, \qquad \varepsilon_9 = 9!\, \varepsilon_1 \approx -0.16$$

Ασταθής Αλγόριθμος (απλή ακρίβεια)

$$I_n = 1 - n I_{n-1}$$

n	$\widetilde{I}_n$
1	0.367879
2	0.264242
3	0.207274
4	0.170904
5	0.145480
6	0.127120
7	0.110160
8	0.118720 ;
9	−0.068480 ; !
10	1.672874
11	−17.401619
12	209.819427
13	−2726.652588
14	38174.136719
15	−572611.062500

Ασταθής Αλγόριθμος (διπλή ακρίβεια)

$$I_n = 1 - n I_{n-1}$$

n	$\widetilde{I}_n$	
1	0.367879	
2	0.264242	
3	0.207274	
4	0.170904	
5	0.145480	
6	0.127120	
7	0.110160	
8	0.118720	;
9	−0.068480	; !
10	1.684800	
11	−17.532800	
12	211.393600	
13	−2747.116799	
14	38460.635199	
15	−576908.527985	

Η μέθοδος

$$\widetilde{I}_{n-1} = \frac{1 - \widetilde{I}_n}{n}$$

είναι ευσταθής. Αν θέσουμε $\widetilde{I}_{20} = 0$, τότε το σφάλμα είναι κατ' απόλυτο τιμή μικρότερο του $1/21$.

Αιτιολόγηση της ευστάθειας

Υποθέτουμε ότι αντί της ακριβούς τιμής I_m, ξεκινάμε τον αλγόριθμο με μια προσέγγισή της $\widetilde{I}_m$, $\widetilde{I}_m \neq I_m$, και στη συνέχεια εκτελούμε τις πράξεις *ακριβώς*, δηλαδή χωρίς να υπεισέρχονται νέα σφάλματα. Τότε θα έχουμε $\widetilde{I}_{n-1} = (1 - \widetilde{I}_n)/n$, οπότε, αφαιρώντας από την αντίστοιχη σχέση που ικανοποιούν τα I_n, παίρνουμε

$$I_{n-1} - \widetilde{I}_{n-1} = -\frac{1}{n}(I_n - \widetilde{I}_n), \quad n = m, m-1, m-2, \dots, \ell + 1.$$

Παρατηρήστε ότι το σφάλμα $I_n - \widetilde{I}_n$ *διαιρείται* στο βήμα n με $-n$. Μάλιστα, όπως διαπιστώνει κανείς επαγωγικά, η ανωτέρω σχέση δίνει

$$I_\ell - \widetilde{I}_\ell = (-1)^{m-\ell} \frac{1}{(\ell+1)(\ell+2)\cdots m}(I_m - \widetilde{I}_m), \quad \ell < m.$$

Συμπεραίνουμε έτσι ότι

$$|I_\ell - \widetilde{I}_\ell| = \frac{1}{(\ell+1)(\ell+2)\cdots m}|I_m - \widetilde{I}_m|, \quad \ell < m.$$

Μάλιστα το αρχικό σφάλμα $|I_m - \widetilde{I}_m|$ καταστέλλεται σε κάθε βήμα και έτσι το τελικό σφάλμα $|I_\ell - \widetilde{I}_\ell|$ είναι πολύ μικρότερο του αρχικού $|I_m - \widetilde{I}_m|$, αν εκτελέσουμε αρκετά βήματα του αλγορίθμου, δηλαδή αν το n είναι αρκετά μικρότερο του m. Επομένως ο αλγόριθμος είναι όντως ευσταθής.

Ευσταθής Αλγόριθμος (απλή ακρίβεια)

$$I_{n-1} = (1 - I_n)/n$$

n	$\widetilde{I}_n$
20	0.0000000
19	0.0500000
18	0.0500000
17	0.0527778
16	0.0557190
15	0.0590176
14	0.0627322
13	0.0669477
12	0.0717733
11	0.0773522
10	0.0838771
9	0.0916123
8	0.1009320

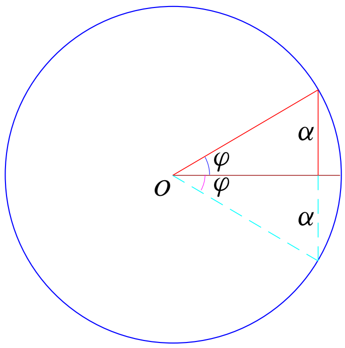
$$\varepsilon_n = (-1)^{m-n} \frac{1}{(n+1)(n+2)\cdots m} \varepsilon_m$$

$2^{\underline{o}}$ **Παράδειγμα.** Προσέγγιση του π με τη μέθοδο του Αρχιμήδη.

Έστω

$$y_n = 2^n \sin\frac{\pi}{2^n}, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Για $n \geqslant 2$, το $2y_n$ είναι η περίμετρος του εγγεγραμμένου στον μοναδιαίο κύκλο κανονικού πολυγώνου με 2^n πλευρές.



$\varphi = \frac{\pi}{2^n}, \quad 2\varphi = \frac{2\pi}{2^n},$
$\alpha = \sin\frac{\pi}{2^n}, \quad 2\alpha = 2\sin\frac{\pi}{2^n}.$

Σχήμα 1: Το εγγεγραμμένο στον μοναδιαίο κύκλο κανονικό πολύγωνο με 2^n πλευρές έχει πλευρά $2\alpha = 2\sin\frac{\pi}{2^n}$ και περίμετρο $2^n \cdot 2\sin\frac{\pi}{2^n} = 2y_n$.

Η ακολουθία $(y_n)_{n\in\mathbb{N}}$ είναι γνησίως αύξουσα και συγκλίνει στο π:

Πραγματικά έχουμε

$$y_n = 2^n \sin\frac{\pi}{2^n} = 2^n\, 2\sin\frac{\pi}{2^{n+1}}\cos\frac{\pi}{2^{n+1}} = y_{n+1}\cos\frac{\pi}{2^{n+1}} < y_{n+1},$$

συνεπώς η ακολουθία είναι γνησίως αύξουσα.

Επί πλέον, χρησιμοποιώντας τη γνωστή σχέση $|\sin x| \leqslant |x| \leqslant |\tan x|$, για $x \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2})$, λαμβάνουμε, $|\cos x| \leqslant \left|\frac{\sin x}{x}\right| \leqslant 1$, υποθέτοντας ότι $x \neq 0$, και διαπιστώνουμε αμέσως ότι, για $\alpha \in \mathbb{R}$,

$$\lim_{x\to 0}\frac{\sin(\alpha x)}{x} = \alpha,$$

ιδιαίτερα λοιπόν, αφού

$$y_n = \frac{\sin\frac{\pi}{2^n}}{\frac{1}{2^n}},$$

συμπεραίνουμε ότι η ακολουθία μας συγκλίνει στο π,

$$\lim_{n\to\infty} y_n = \pi.$$

Τώρα $y_1 = 2$ και

$$
\begin{aligned}
y_{n+1} &= 2^{n+1}\, \sin\frac{\pi}{2^{n+1}} = 2^{n+1}\left[\frac{1-\cos\pi/2^n}{2}\right]^{1/2} \\
&= 2^{n+1}\left[\frac{1-\sqrt{1-\sin^2\pi/2^n}}{2}\right]^{1/2},
\end{aligned}
$$

συνεπώς

$$
y_{n+1} = 2^{n+1}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1-\sqrt{1-(2^{-n}y_n)^2}\right)}.
$$

Αυτή είναι μια *ασταθής* μέθοδος.

Ασταθής Αλγόριθμος (απλή ακρίβεια)

$$\pi = 3.141592653590$$

$$y_{n+1} = 2^{n+1}\sqrt{\frac{1}{2}\left(1 - \sqrt{1 - (2^{-n} y_n)^2}\right)}$$

n	$\tilde{y}_n$
1	2.
2	2.828427076340
3	3.061467409134
4	3.121444463730
5	3.136546134949
6	3.140333414078
7	3.141285657883
8	3.141518831253
9	3.141207933426
10	3.142451286316
11	3.142451286316
12	3.162277698517
13	3.162277698517
14	2.828427076340
15	0.000000000000

Ασταθής Αλγόριθμος (διπλή ακρίβεια)

$$\pi = 3.141592653590$$

$$y_{n+1} = 2^{n+1}\sqrt{\frac{1}{2}\Big(1-\sqrt{1-(2^{-n}y_n)^2}\Big)}$$

n	$\tilde{y}_n$
1	2.
2	2.828427124746
3	3.061467458921
4	3.121445152258
5	3.136548490546
16	3.141592645321
23	3.141829681889
24	3.142451272494
25	3.142451272494
26	3.162277660168
27	3.162277660168
28	3.464101615138
29	4.000000000000
30	0.000000000000

Τώρα

$$1 - \sqrt{1 - (2^{-n} y_n)^2} = \frac{2^{-2n} (y_n)^2}{1 + \sqrt{1 - (2^{-n} y_n)^2}},$$

οπότε

$$y_{n+1} = \sqrt{\frac{2}{1 + \sqrt{1 - (2^{-n} y_n)^2}}}\, y_n \, .$$

Αυτή είναι μια *ευσταθής* μέθοδος.

Ευσταθής Αλγόριθμος (απλή ακρίβεια)

$$\pi = 3.141592653590$$

$$y_{n+1} = \sqrt{\frac{2}{1+\sqrt{1-(2^{-n}y_n)^2}}}\, y_n$$

n	$\tilde{y}_n$
1	2.
2	2.828427076340
3	3.061467409134
4	3.121444940567
5	3.136548280716
6	3.140331029892
7	3.141277074814
8	3.141513347626
9	3.141572475433
10	3.141587018967
11	3.141590833664
12	3.141591548920
13	3.141591548920

Ευσταθής Αλγόριθμος (διπλή ακρίβεια)

$$\pi = 3.141592653590$$

$$y_{n+1} = \sqrt{\frac{2}{1 + \sqrt{1 - (2^{-n} y_n)^2}}}\, y_n$$

n	$\tilde{y}_n$
1	2.
2	2.828427124746
3	3.061467458921
4	3.121445152258
5	3.136548490546
10	3.141587725277
11	3.141591421511
24	3.141592653585
25	3.141592653589
26	3.141592653589
27	3.141592653590
28	3.141592653590