Metody numeryczne

Program wykładu

1. Dokładność
2. Układy równań liniowych
3. Równania nieliniowe – metody iteracyjne
4. Interpolacja
5. Aproksymacja
6. Różniczkowanie
7. Metody rozwiązywania warunków brzegowych równań różniczkowych zwyczajnych
8. Całkowanie
9. Miejsca zerowe wielomianów
10. Generatory liczb pseudolosowych i metody ich testowania
11. Metoda Monte Carlo
12. Metody geometrii obliczeniowej

Literatura

1. Kordecki W., Selwat K., Metody numeryczne dla informatyków, Helion, 2020.
2. Mikołajczak P., Ważny M., Metody numeryczne w C++, Instytut Informatyki UMCS, 2012.
3. Majchrzak E., Michnacki B., Metody numeryczne, Podstawy teoretyczne, aspekty praktyczne i algorytmy, WPŚ, Gliwice 2004
4. Burden R.L., Faires.D., Numerical Analysis. PWS-KENT Publishing Company, Boston 1984.
5. Tatjewski P., Metody numeryczne. OWPW, Warszawa 2013.
6. Dahlquist G., Bjorck L., Metody numeryczne. PWN, Warszawa 1983.
7. Fortuna Z., Macukow B., Wąsowski J., Metody numeryczne. WN-T, Warszawa 1982.
8. Harel D., Rzecz o istocie informatyki, algorytmika. WN-T, Warszawa 1992.
9. Kiełbasiński A., Schwetlick H., Numeryczna algebra liniowa. WN-T, Warszawa 1992.
10. Ralston A., Wstęp do analizy numerycznej. PWN, Warszawa 1983.
11. Stoer J., Bulirsch R., Wstęp do analizy numerycznej. PWN, Warszawa 1987.

Metody numeryczne

Metody numeryczne są działem matematyki stosowanej. Zajmują się badaniem sposobów umożliwiających rozwiązywanie zadań matematycznych za pomocą działań arytmetycznych.

Metody numeryczne:

- wykorzystywane środki - analiza matematyczna, algebra (dowody matematyczne dowodzą poprawności metod),

- nowoczesne metody numeryczne - znajomość języków programowania i odpowiednich bibliotek,
- jedno z podstawowych narzędzi pracy inżyniera,
- służą do analiz i symulacji problemów z zakresu fizyki, mechaniki, elektrotechniki, medycyny, ekonomii i wielu innych,
- praktyczne ich zastosowanie sprowadza się najczęściej do wykonania ściśle określonego algorytmu w postaci skończonej liczby działań arytmetycznych oraz logicznych (często również opracowania indywidualnej metody dla bardziej złożonego zagadnienia),
- korzystając z metod numerycznych możemy otrzymać rozwiązanie dokładne lub przybliżone.

Narzędzia

Lista narzędzi wykorzystywanych w analizie numerycznej:

https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_numerical-analysis_software (https://en.wikipedia.org/wiki/List_of_numerical-analysis_software)

Porównanie narzędzi:

https://en.wikipedia.org/wiki/Comparison_of_numerical-analysis_software (https://en.wikipedia.org/wiki/Comparison_of_numerical-analysis_software)

Najważniejsze pojęcia

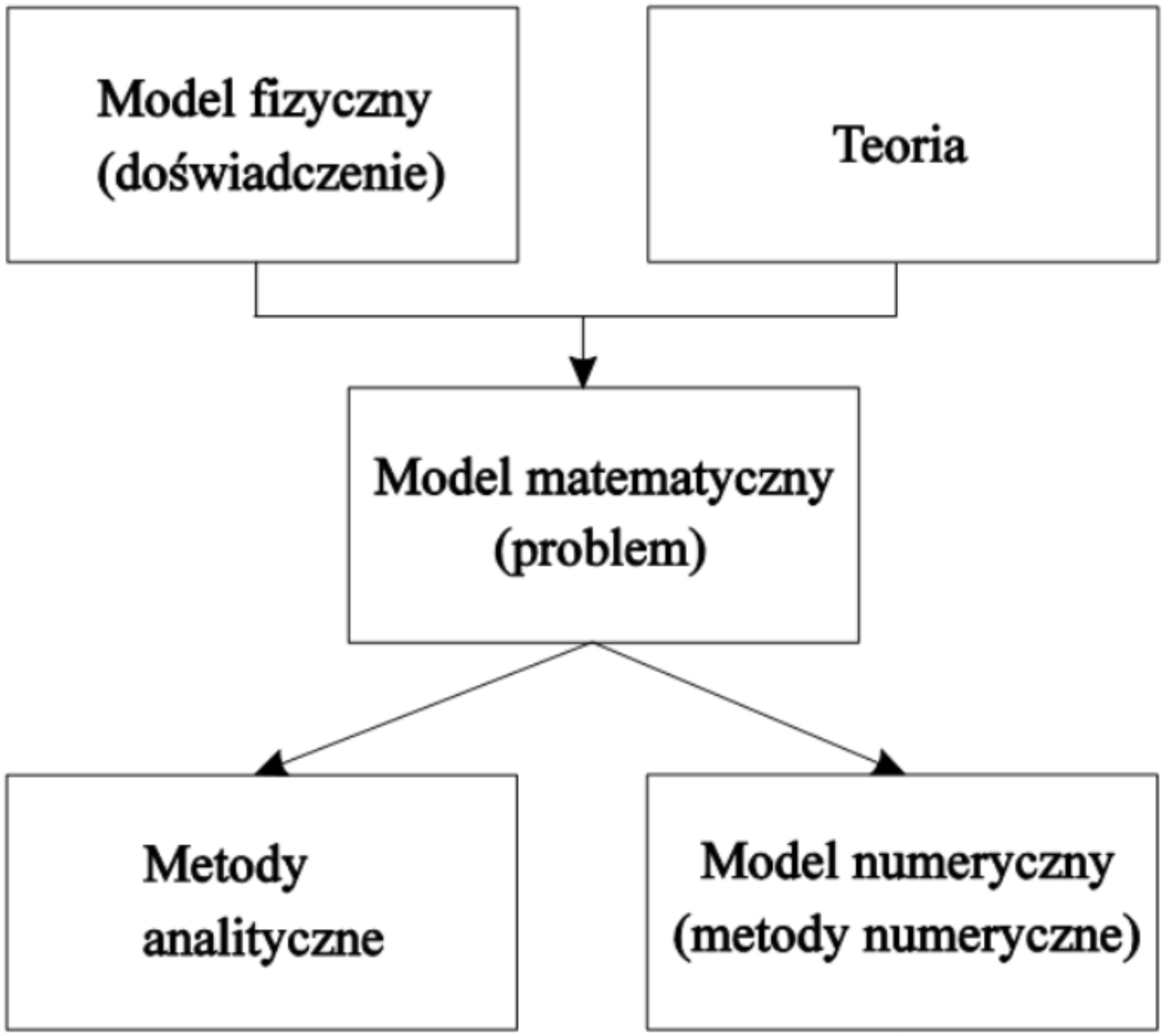
Dokładność (miara dokładności) - dopuszczalny błąd wyniku, ustalany najczęściej arbitralnie przez numeryka na podstawie jego doświadczenia.

Zbieżność iteracji - stopniowe zbliżanie się do wartości dokładnej (poszukiwanej) w procesie iteracji. Proces iteracyjnego poszukiwania wartości kończy się, gdy wartość ta zostanie osiągnięta z zadaną dokładnością.

Dyskretyzacja - zastąpienie rozważanego obiektu, składającego się z nieskończonej liczby punktów, obiektem równoważnym rozpatrywanemu, ale składającym się ze skończonej liczby punktów charakterystycznych, zwanych węzłami. Obiekt ciągły zastąpiony zostaje obiektem nieciągłym.

Model - reprezentacja badanego obiektu w postaci innej, niż ta, w której występuje on w rzeczywistości, w nauce model jest rozumiany jako celowo uproszczona reprezentacja rzeczywistości.

Model matematyczny (problem) - reprezentacja istniejącego lub hipotetycznego fragmentu rzeczywistości, tworzona w określonym celu, z wykorzystaniem skończonego zbioru symboli i operatorów matematycznych, z którymi związane są ścisłe zasady posługiwania się nimi. Model matematyczny pozbawiony jest szczegółów i cech nieistotnych dla osiągnięcia postawionego celu. Symbole i operatory matematyczne zawarte w modelu mają interpretację odnoszącą je do konkretnych elementów modelowanego fragmentu rzeczywistości.



Wykład 1. Dokładność

Plan

1. Błędy obliczeń
2. Typy całkowite i zmiennopozycyjne
3. Uwarunkowanie zadania
4. Algorytm i jego numeryczne realizacje
5. Stabilność i niestabilność numeryczna

Błędy obliczeń

Błąd jest różnicą między wartością dokładną i wartością przybliżoną.

Błąd bezwzględny Δ liczby x - wartość bezwzględna różnicy pomiędzy liczbą dokładną x liczbą przybliżoną $\bar{x}$:

$$\Delta = |x - \bar{x}|$$

Jeśli wartość dokładna nie jest znana, to zamiast błędu bezwzględnego oblicza się kres górny (oszacowanie od góry) błędu bezwzględnego.

Błąd względny δ liczby x - stosunek błędu bezwzględnego Δ tej liczby do wartości bezwzględnej liczby dokładnej x ($x \neq 0$):

$$\delta = \frac{\Delta}{|x|} = \frac{|x - \bar{x}|}{|x|}$$

Zródła błedów w obliczeniach numerycznych moga miec różny charakter.

Moga to byc zwłaszcza:

- błędy zaookrągleń wynikające z arytmetyki komputera,
- błedy obciecia (np. konieczność zakończenia obliczeń na pewnym etapie dla procesów nieskończonych)
- błedy programisty
- błedy danych wejsciowych (np. dane zaokraglone z wczesniejszych obliczen, dane z pomiarów, stałe fizyczne),
- błędy modelu (np. zbytnie uproszczenie modelu matematycznego),
- błędy metody (np. duże błędy dla pewnego rodzaju danych wejściowych).

Błędy zaokrągleń

W sposób ścisły można reprezentowaś w komputerze tylko liczby całkowite (z pewnego zakresu) oraz liczby wymierne, posiadające skończone rozwinięcia binarne (z pewnego zakresu). Wszystkie inne liczby można reprezentoważ tylko w sposób przybliżony. Są one zatem obarczone pewnym błędem, zwanym błędem zaokrąglenia. Zaokrągleniem liczby nazywamy zatem odrzucenie z niej wszystkich cyfr, poczynając od pewnego miejsca.

Rozwinięciem binarnym liczby $\frac{1}{5}$ jest rozwinięcie nieskończone, okresowe $0.(0011)_2$. Analogicznie $\frac{1}{10} = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{5} = 0.0(0011)_2$. Zatem, ułamki typu $\frac{1}{10}$, $\frac{1}{100}$ itd nie mogą być dokładnie reprezentowane w pamięci. Komputer zapamiętuje tylko ich skończone przybliżenia, obarczone błędęm zaokrąglenia.

Cyfry znaczące

Niech x będzie liczbą rzeczywistą, mającą ogólnie nieskończone rozwinięcie dziesiętne. Cyfry tego rozwinięcia numerujemy w następujący sposób: cyfra jedności ma numer zero, cyfra dziesiątek ma numer jeden, cyfra setek ma numer dwa itd. Cyfry części ułamkowej rozwinięcia dziesiętnego mają numery ujemne.

Liczba x jest poprawnie zaokrąglona na d-ej pozycji do liczby, którą oznaczamy $x^{(d)}$, jeśli błąd zaokrąglenia ϵ jest taki, że:

$$\epsilon = |x - x^{(d)}| \leq \frac{1}{2} \cdot 10^d$$

Jeśli $\bar{x}$ jest przybliżeniem dokładnej wartości x, to k-tą cyfrę dziesiętną liczby x nazywamy **znaczącą**, jeśli :

$$|x - \bar{x}| \leq \frac{1}{2} \cdot 10^k$$

Wynika stąd, że każda cyfra poprawnie zaaokrąglonej liczby, począwszy od pierwszej cyfry różnej od 0, jest znacząca. Liczba cyfr znaczących jest pewną miarą błędu zaokrąglenia. Jeśli zatem, w wyniku obliczeń otrzymamy pewną wielkość $\bar{x}$ z dokładnością do ϵ, to możemy jedynie stwierdzić, że dokładna wartość leży w przedziale $[\bar{x} - \frac{\epsilon}{2}, \bar{x} + \frac{\epsilon}{2}]$.

Typy całkowite

Dowolną liczbę całkowitą x można przedstawić w postaci rozwinięcia dwójkowego:

$$x = s \sum_{i=0}^{n} e_i \times 2^i$$

gdzie

s - znak liczby ($a = 1$ lub $s = -1$)

$e_i = 0$ lub $e_i = 1$

Jeżeli do zapisu liczby wykorzystujemy $d + 1$ bitów, to gdy $n < d$ — liczba x może być reprezentowana w wybranej arytmetyce i zapisana jako:

$$\underset{\text{znak}}{\boxed{s}}\underbrace{\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|}\hline 0 & \dots & 0 & e_n & e_{n-1} & \dots & e_0 \\ \hline\end{array}}_{d \text{ cyfr dwójkowych}}$$

W ten sposób mogą być reprezentowane liczby z zakresu $[\ -2^d,\ 2^d\ -\ 1]$. Liczby całkowite w zależności od d mogą przyjmować wartości z różnych zakresów.

W zasadzie wszystkie obliczenia na liczbach całkowitych dokonywane są dokładnie. Wyjątki od tej reguły są dwa:

- Operacja dzielenia zazwyczaj nie wyprowadza poza typ całkowity. Jest to dzielenie całkowitoliczbowe („z resztą").
- Wynik działania wykracza poza dopuszczalny zakres; podawany jest wówczas modulo $2d$

Typy zmiennopozycyjne

Struktura liczby zmiennopozycyjnej (zmiennoprzecinkowej) jest następująca:

$$x = m \cdot p^c,$$

gdzie:

m -mantysa,

c - cecha (wykładnik),

p - podstawa systemu (np. 2, 10).

W tym zapisie liczba rzeczywista jest przedstawiona za pomocą dwóch grup bitów: mantysy (części ułamkowej) oraz wykładnika (cechy, liczby całkowitej).

W realizacji komputerowej wykładnik (cecha) liczby x zapisywana jest na $d - t$ bitach, pozostałe t bitów przeznaczonych jest na reprezentację mantysy m. Zatem zamiast (na ogół nieskończonego) rozwinięcia mantysy:

$$m = \sum_{i=1}^{\infty} e_{-i} \times 2^{-i}$$

$e_{-1} = 1$, $e_i = 0$ lub $e_i = 1$ dla $i > 1$

korzystamy (zakładając, że mantysa została prawidłowo zaaokrąglona do t cyfr

$$m_t = \sum_{i=1}^{t} e_{-i} \times 2^{-i}$$

wówczas

$$|m - m_t| \leq \frac{1}{2} \cdot 2^{-t}$$

Liczba x może być zapisana w następujący sposób:

$$\boxed{s}\underbrace{\boxed{s_c}\boxed{e_{d-t-1}}\boxed{e_{d-t-2}}\boxed{\dots}\boxed{e_0}}_{d-t\ \text{bitów cechy}}\underbrace{\boxed{e_{-1}}\boxed{e_{-2}}\boxed{\dots}\boxed{e_{-t}}}_{t\ \text{bitów mantysy}}$$

Oznaczmy przez $rd(x)$ reprezentację zmiennopozycyjną (maszynowe przybliżenie) liczby x, czyli $rd(x) = s \cdot 2^c \cdot m_t$.

Jeśli $x \neq 0$ spełniona jest następująca nierówność:

$$\left|\frac{rd(x) - x}{x}\right| \leq 2^{-t}$$

czyli

$$rd(x) = x(1 + \epsilon), \quad \text{gdzie } |\epsilon| \leq 2^{-t} = \text{eps}$$

Liczby rzeczywiste reprezentowane są, na ogół, niedokładnie. Błąd względny ϵ jest nie większy od 2^{-t} . We współczesnych komputerach t przyjmuje wartości: 24 dla liczb typu float (32-bitowych) lub 53 (double; 64 bity).

Liczba cyfr mantysy decyduje o dokładności liczb rzeczywistych, a liczba cyfr cechy — o ich zakresie. Cecha $w \in [w_{min}, w_{max}]$, gdzie $w_{min} = -w_{max} - 1 = 2^{d-t-1}$.

Arytmetyka zmiennopozycyjna

Cztery elementarne działania arytmetyczne: dodawanie (+), odejmowanie (−), mnożenie (·), dzielenie (/). Wynikiem działań na liczbach maszynowych jest na ogół liczba maszynowa. Przez „fl" oznaczymy wynik działania zmiennopozycyjnego, wtedy wyniki elementarnych działań arytmetycznych możemy zapisać w postaci:

- $fl(x \pm y) = (x \pm y) \cdot (1 + \epsilon)$,
- $fl(x \cdot y) = (x \cdot y) \cdot (1 + \epsilon)$,
- $fl(x/y) = (x/y) \cdot (1 + \epsilon)$

gdzie $|\epsilon| \leq \mathrm{eps}$. Przyjmujemy, że błąd elementarnych operacji arytmetycznych to jedynie błąd zaokrąglenia dokładniego wyniku tych operacji.

Błędy i dokładność - podsumowanie

- Wykorzystywane w obliczeniach dane wejściowe to najczęściej liczby obarczone błędami reprezentacji maszynowej.
- Elementarne operacje arytmetyczne (całe ciągi tych operacji) również wprowadzają błędy w trakcie obliczeń.
- Błędy te ulegają propagacji i modyfikacji, może nastąpić kumulacja błędów.
- Całkowity błąd zadania obliczanego numerycznie jest z reguły znacznie większy od dokładności maszynowej.
- Błędy takie można analizować różnymi metodami, np. metodą probabilistyczną lub metodą najgorszego przypadku.
- Błąd algorytmu - łączny wpływ na obliczony wynik wszystkich błędów zaokrągleń, występujących podczas realizacji algorytmu
- Koszt algorytmu - mierzony najczęściej liczbą niezbędnych działań oraz niezbędnym obciążeniem pamięci komputera. Innym miernikiem kosztu algorytmu może być czas wykonywania obliczeń.

Zadanie numeryczne

Zadanie numeryczne - jasny i jednoznaczny opis powiązania funkcjonalnego między danymi wejściowymi, czyli zmiennymi niezależnymi zadania i danymi wyjściowymi, tj. szukanymi wynikami.

Zadania rozwiązywane numerycznie najczęściej nie występują samodzielnie, ale pojedynczo lub grupowo, jako zadania częściowe przy rozwiązywaniu złożonych problemów z różnych dziedzin zastosowań. Mówimy wtedy o klasie zadań.

Matematycznie zadanie obliczeniowe można przedstawić jako pewne odwzorowanie

$\Phi : R_n \rightarrow R_m$:

$$w = \Phi(d),$$

- $d = [d_1, d_2, \ldots, d_n]^T$ - wektor danych wejściowych
- $w = [w_1, w_2, \ldots, w_n]^T$ - wektor wyniku, rozwiązanie

W praktyce dysponujemy jedynie reprezentacjami maszynowymi danych:

$$rd(d_i) = d_i(1 + \epsilon_i)$$

gdzie $|\epsilon| \leq \text{eps}, \quad i = 1, 2, \ldots, n.$

Uwarunkowanie zadania

Zadanie jest źle uwarunkowane, jeśli względnie małe błędy danych początkowych powodują duże błędy wyników obliczeń. Zadnie źle uwarunkowane obarczone jest dużymi błędami wyników niezależnie od zastosowanej metody lub algorytmu obliczania.

Uwarunkowanie zadania numerycznego to wrażliwość jego rozwiązania na poprawność danych początkowych.

Wskaźnikiem uwarukowania nazywamy wielkość charakteryzującą ilościowo maksymalny możliwy stosunek (iloraz) względnego błędu wyniku do względnego błędu (zaburzenia) danych. Dla błędów względnych definicja ta dotyczy względnego wskaźnika uwarunkowania.

Algorytm i jego numeryczne realizacje

Rozróżniamy trzy podstawowe pojęcia:

- Zadanie obliczeniowe (matematyczne): $w = \Phi(d)$
- Algorytm $A(d)$ obliczenia wyniku zadania $\varphi(d)$, sposób wyznaczenia wyniku zgodnie z jednoznacznie określoną kolejnością wykonywania elementarnych działań arytmetycznych
- Numeryczna realizacja $fl(A(d))$ algorytmu $A(d)$, polegająca na:
  - zastąpieniu liczb występujących w sformułowaniu $A(d)$ ich reprezentacjami zmiennopozycyjnymi,
  - wykonaniu operacji arytmetycznych w arytmetyce zmiennopozycyjnej „fl” czyli w sposób przybliżony,
  - operacje arytmetyczne - działania elementarne, obliczanie wartości funkcji standardowych.

Przykład

Załóżmy, że mamy funkcję $\Phi(a, b) = a^2 - b^2$

Zakładamy że $rd(a) = a$ i $rd(b) = b$ czyli zakładamy brak błędów reprezentacji danych. Interesuje nas tylko wpływ błędów elementarnych operacji arytmetycznych.

Rozważmy dwa algorytmy:

- $A_1(a, b) = a \cdot a - b \cdot b$
- $A_2(a, b) = (a + b) \cdot (a - b)$

(realizacja numeryczna - notatka)

Stabilność i niestabilność numeryczna

Algorytm jest niestabilny numerycznie jeśli w trakcie obliczeń "akumuluje się" błąd numeryczny i w rezultacie powstaje mało dokładny wynik. Zatem z niestabilnością numeryczną mamy do czynienia wtedy, gdy małe błędy danych lub popełniane w trakcie obliczeń rosną szybko w trakcie dalszych obliczeń powodując istotne/duże błędy/zniekształcenia wyników obliczeń.

W trakcie różnych operacji arytmetycznych może dochodzić do kumulacji błędów, np. jeśli dwie liczby obarczone są pewnymi znanymi błędami danych wejściowych, to w wyniku wykonania operacji na tych liczbach błędy również zostaną poddane tej operacji powodując kumulację możliwych błędów.

Dla niektórych wartości zmiennych algorytm może generować niedokładne wyniki obliczeń (np. pierwiastkowanie). Wynika to z błędów zaokrągleń wyników pośrednich, które mogą mieć wpływ na brak dokładności wyników końcowych. Jednym z przykładów takich algorytmów jest algorytm rozwiązujący równanie kwadratowe za pomocą "delty".

Algorytmy stabilne eliminują błędy zaokrągleń, dzięki zwiększa się dokładność wyników końcowych. Aby uniknąć błędów zaokrągleń w algorytmie rozwiązującym równanie kwadratowe, do obliczania pierwiastków równania kwadratowego należy zastosować "deltę" w połączeniu ze wzorami Viéte'a. Wynika to stąd, że błąd zaokrąglenia spowodowany jest odejmowaniem bliskich co do wartości liczb. Zachodzi to w liczniku wzorów na pierwiastki równania w algorytmie "delty".

In [ ]: