Analiza Numeryczna

Skrypt z wykładów
Semestr zimowy 2023/2024

Uniwersytet Wrocławski
Wydział Matematyki i Informatyki
Instytut Informatyki

Spis treści

Wykład 1

Wykład 2 Arytmetyka zmiennopozycyjna, podstawy teorii błędów

2.1 Błąd bezwzględny i blad względny

Weźmy liczby:

$$x = 1.23456789 \quad \tilde{x} = 1.2345679$$
$$y = 10^{50} + 1 \quad \tilde{y} = 10^{50}$$

Wtedy błąd bezwzględny to:

$$|x - \tilde{x}| = 10^{-8} \quad |y - \tilde{y}| = 1$$

Błąd względny to:

$$\frac{|x - \tilde{x}|}{|x|} = 0.8 \cdot 10^{-8} \quad \frac{|y - \tilde{y}|}{|y|} = 10^{-50}$$

Błąd względny jest lepszą miarą błędu.
Dodatkowo zdefiniujmy liczbę cyfr dokładnych:

$$acc(v, \tilde{v}) = -\log_{10}\left(\left|1 - \frac{\tilde{v}}{v}\right|\right)$$

Wtedy:

$$acc(x, \tilde{x}) \approx 8.091 \quad acc(y, \tilde{y}) = 50$$

2.2 Reprezentacja liczb w komputerze

Potrafimy reprezentować wszystkie liczby całkowite z pewnego zakresu, ale nie potrafimy reprezentować wszystkich liczb rzeczywistych. Dlatego musimy wybrać pewną reprezentację, która będzie przybliżać liczby rzeczywiste.

a) $l \in \mathbb{Z}$,

$$l = \pm \sum_{i=0}^{n} e_i 2^i, \quad e_i \in \{0, 1\}, \quad e_n = 1$$

Jeśli $n < d$ to OK, a jeśli $n \geq d$ to przepełnienie.

b) $x \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$

TW. Dla każdej liczby rzeczywistej $x \neq 0$ istnieje trójka:

$$m \in \left[\frac{1}{2}, 1\right) \quad \text{(mantysa)}$$

$$c \in \mathbb{Z} \quad \text{(cecha)}$$

$$s \in \{+1, -1\} \quad \text{(znak liczby)}$$

dla których

$$x = s \cdot m \cdot 2^c$$

Trójka (s, m, c) jest wyznaczona jednoznacznie.

Reprezentacja mantysy:

$$m \in \left[\frac{1}{2}, 1\right), \quad m = \sum_{i=1}^{\infty} e_{-i} 2^{-i}, \quad e_{-i} \in \{0, 1\}, \quad e_{-1} = 1$$

Sposoby zaokrąglania mantysy:
i) obcięcie

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

ii) zaokrąglanie symetryczne

$$m_t^r := \sum_{i=1}^{t} e_{-i} 2^{-i} + e_{-(t+1)} 2^{-t}$$

Model zapisu liczby:

$$[\pm] \underbrace{[\text{bity mantysy}]}_{t \text{ bitów}} \quad \underbrace{[\text{cecha ze znakiem}]}_{(d-t) \text{ bitów}}$$

Łącznie: $d + 1$ bitów na liczbę rzeczywistą ze znakiem.
Ten model reprezentacji jest teoretyczny. W praktyce stosujemy standard IEEE 754.

TW.

$$|m - m_t^c| \leq 2^{-t}, \qquad |m - m_t^r| \leq \frac{1}{2} \cdot 2^{-t}$$

Reprezentacja zmiennopozycyjna liczby rzeczywistej $x \neq 0$:

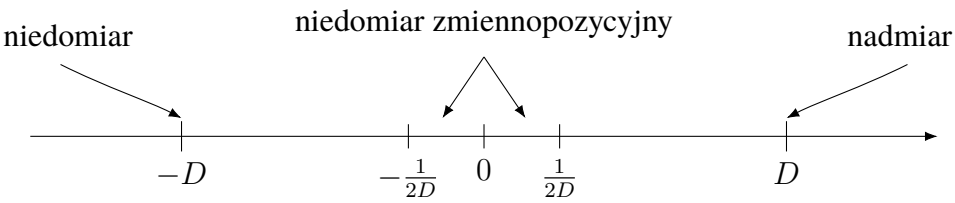
$$x \approx \text{chop}(x) := s \cdot m_t^c \cdot 2^c \qquad \text{albo} \qquad x \approx \text{rd}(x) := s \cdot m_t^r \cdot 2^c$$

Pytanie: Które liczby rzeczywiste można dokładnie reprezentować w komputerze? Jaką one mają postać?
TW.

$$\left|\frac{\text{chop}(x) - x}{x}\right| \leq 2 \cdot 2^{-t}, \qquad \left|\frac{\text{rd}(x) - x}{x}\right| \leq 2^{-t}$$

Jakie liczby, tzn. z jakiego zakresu, 'zna' komputer?
Niech

$$C_{\max} = 2^{d-t-1} - 1, \qquad D := 2^{C_{\max}}.$$



W rzeczywistości w komputerze możemy reprezentować liczby ze zbioru $X' := (-D, D)$. W pamięci pojawiają się liczby ze zbioru dyskretnego $X_{fl} := \mathrm{rd}(X')$.

Przykład. Rozważmy arytmetykę dla

$$d = 5, \qquad t = 3.$$

Wtedy:

$$C_{\max} = 2^{d-t-1} - 1 = 2^1 - 1 = 1, \qquad D = 2^{C_{\max}} = 2.$$

Możliwe mantysy:

$$m \in \left\{ \frac{1}{2}, \frac{5}{8}, \frac{3}{4}, \frac{7}{8} \right\},$$

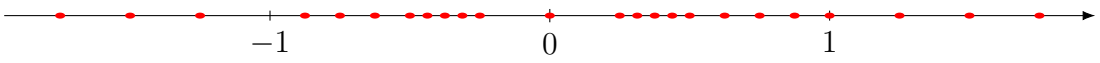
a cecha:

$$c \in \{-1, 0, 1\}.$$

Dodatnie liczby znormalizowane:

$$\left\{ \frac{1}{4}, \frac{5}{16}, \frac{3}{8}, \frac{7}{16}, \frac{1}{2}, \frac{5}{8}, \frac{3}{4}, \frac{7}{8}, 1, \frac{5}{4}, \frac{3}{2}, \frac{7}{4} \right\}.$$

Zbiór X_{fl} jest symetryczny względem zera (dochodzi też liczba 0).



Zmiennopozycyjna realizacja działań arytmetycznych:

$$\mathrm{fl}(x \circ y) := (x \circ y)\,(1 + \varepsilon_{x \circ y}), \qquad \circ \in \{+, -, *, /\}, \qquad x, y \in X_{fl}.$$

Błąd względny pojedynczej operacji spełnia:

$$|\varepsilon_{x \circ y}| \leq 2^{-t}.$$

Równoważnie:

$$\left| \frac{x \circ y - \mathrm{fl}(x \circ y)}{x \circ y} \right| = |\varepsilon_{x \circ y}|.$$

Aby analizować (symulować) działanie algorytmów w arytmetyce zmiennopozycyjnej, będziemy często posługiwać się tzw. twierdzeniem o kumulacji błędów.

TW. (o kumulacji błędów)
Niech zachodzi

$$|\delta_i| \leq 2^{-t}, \qquad i = 1, 2, 3, \ldots, n,$$

oraz niech

$$1 + \sigma_n := \prod_{i=1}^{n} (1 + \delta_i).$$

Wtedy

$$\sigma_n = \sum_{i=1}^{n} \delta_i + O\big(2^{-2t}\big)\,.$$

Jeśli dodatkowo

$$n \cdot 2^{-t} < 2,$$

to

$$|\sigma_n| \le \gamma_n := \frac{n \cdot 2^{-t}}{1 - \frac{1}{2} n \cdot 2^{-t}} \approx n \cdot 2^{-t}.$$

Użyjemy twierdzenia o kumulacji błędów do analizy zmiennopozycyjnej realizacji prostego programu komputerowego.

Przykład. Rozważmy zadanie obliczenia sumy liczb x_1, x_2, x_3, x_4, x_5, tzn.

$$S = \sum_{i=1}^{5} x_i.$$

Wartość S wyznaczamy przy pomocy następującego ('naturalnego') programu:

$S := x_1$
for $i = 2$ **to** 5
  $S := S + x_i$
return S

Jak wygląda zmiennopozycyjna realizacja programu?

Dla uproszczenia przyjmijmy, że

$$\mathrm{rd}(x_i) = x_i, \qquad 1 \le i \le 5$$

tj. dane wejściowe są liczbami maszynowymi.

Wtedy realizacja zmiennopozycyjna programu ma postać:

$$\mathrm{fl}(P) = \Big(\Big(\big((x_1 + x_2)(1 + \xi_2) + x_3\big)(1 + \xi_3) + x_4\Big)(1 + \xi_4) + x_5\Big)(1 + \xi_5),$$

gdzie

$$|\xi_2|, |\xi_3|, |\xi_4|, |\xi_5| \le 2^{-t}.$$

Po uporządkowaniu względem x_i:

$$\begin{aligned}\mathrm{fl}(P) = {} & x_1(1 + \xi_2)(1 + \xi_3)(1 + \xi_4)(1 + \xi_5) \\ & + x_2(1 + \xi_2)(1 + \xi_3)(1 + \xi_4)(1 + \xi_5) \\ & + x_3(1 + \xi_3)(1 + \xi_4)(1 + \xi_5) \\ & + x_4(1 + \xi_4)(1 + \xi_5) + x_5(1 + \xi_5).\end{aligned}$$

Oznaczmy:

$$1 + E_i := \prod_{j=i}^{5}(1 + \xi_j), \qquad i = 2, 3, 4, 5, \qquad E_1 := E_2.$$

Wówczas

$$\text{fl}(P) = \sum_{i=1}^{5} x_i(1 + E_i).$$

Z twierdzenia o kumulacji błędów otrzymujemy (w pierwszym rzędzie):

$$|E_2| \leq \gamma_4 \lesssim 4 \cdot 2^{-t}, \qquad |E_3| \leq \gamma_3 \lesssim 3 \cdot 2^{-t},$$

$$|E_4| \leq \gamma_2 \lesssim 2 \cdot 2^{-t}, \qquad |E_5| = |\xi_5| \leq 2^{-t}.$$

Badamy błąd względny:

$$\left|\frac{S - \text{fl}(P)}{S}\right| = \left|\frac{\sum_{i=1}^{5} x_i - \sum_{i=1}^{5} x_i(1 + E_i)}{\sum_{i=1}^{5} x_i}\right| = \left|\frac{\sum_{i=1}^{5} x_i E_i}{\sum_{i=1}^{5} x_i}\right|.$$

Stąd

$$\left|\frac{S - \text{fl}(P)}{S}\right| \leq \frac{\sum_{i=1}^{5} |x_i||E_i|}{\left|\sum_{i=1}^{5} x_i\right|} \leq \left(\frac{\sum_{i=1}^{5} |x_i|}{\left|\sum_{i=1}^{5} x_i\right|}\right) \cdot 4 \cdot 2^{-t}.$$

Wprowadzamy oznaczenie:

$$K := \frac{\sum_{i=1}^{5} |x_i|}{\left|\sum_{i=1}^{5} x_i\right|}.$$

Wtedy

$$\left|\frac{S - \text{fl}(P)}{S}\right| \lesssim K \cdot 4 \cdot 2^{-t}.$$

Wniosek.

- Jeśli sumujemy liczby dodatnie, to warto je najpierw posortować.
- Jeśli wszystkie x_i mają ten sam znak, to $K = 1$.
- Może jednak być tak, że K jest dowolnie duże.

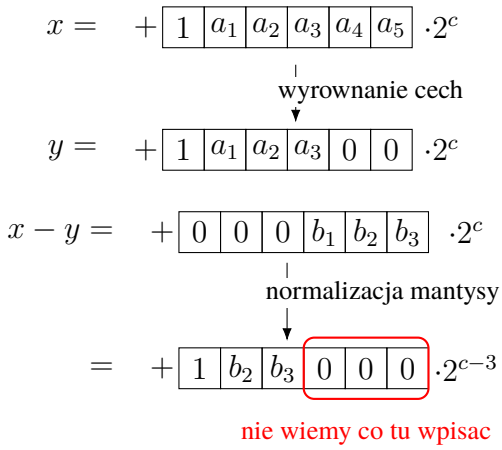
2.3 Zjawisko utraty cyfr znaczących

Problem utraty cyfr znaczących prześledźmy na przykładzie.
Niech

$$x, y \in X_{fl}, \qquad x > y > 0, \qquad x \approx y.$$

Przy odejmowaniu $x - y$ najpierw wyrównujemy cechy (przesuwamy mantysę jednej z liczb), a następnie odejmujemy mantysy. Gdy liczby są bliskie, najstarsze cyfry (bity) mantysy się redukują i wynik zaczyna się od wielu zer.
W efekcie:

- w wyniku zostaje mało cyfr znaczących,
- względny błąd wyniku może istotnie wzrosnąć.



Przykład numeryczny (kod demonstracyjny).

```
f1:=z->ln(z)-1;

x:=exp(1.0001):

printf("         x = %1.10e\n\n",x);
printf("      f1(x) = %1.10e dla Digits:=%d\n ",f1(x),Digits);
printf(" Wynik dokladny = %1.30e\n\n",evalf(f1(x),64));

x = 2.7185536700e+00
f1(x) = 1.0000000000e-04 dla Digits:=10
Wynik dokladny = 9.99999140155506045938191304895 6e-05

f2:=z->ln(z/exp(1.0));
```

```
x:=exp(1.0001):

printf("         x = %1.10e\n\n",x);
printf("      f2(x) = %1.10e dla Digits:=%d\n ",f2(x),Digits);
printf(" Wynik dokladny = %1.30e\n\n",evalf(f1(x),64));

x = 2.7185536700e+00
f2(x) = 9.9999999830e-05 dla Digits:=10
Wynik dokladny = 9.99999140155506045938191304895 6e-05
```

Wykład 3 Uwarunkowanie zadania, algorytmy numerycznie poprawne

Przykład. Rozważmy wielomian

$$\omega(x) = (x-1)(x-2)\cdots(x-20) = \sum_{i=0}^{20} a_i x^i = x^{20} - 210x^{19} + \dots$$

oraz jego zaburzenie

$$\widetilde{\omega}(x) := \omega(x) - \varepsilon x^{19}, \qquad \varepsilon \text{ małe.}$$

Przy bardzo małym ε (np. $\varepsilon = 2^{-30}$) można zaobserwować:

- minimalna zmiana danych (współczynników),
- duża zmiana wyniku (położenia miejsc zerowych).

Przykład (macierz Hilberta).

$$H_n = \left[\frac{1}{i+j-1}\right] \in \mathbb{R}^{n\times n}, \qquad \widetilde{H}_n = \left[\mathrm{rd}\left(\frac{1}{i+j-1}\right)\right] \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Badamy:

$$\det(H_n), \qquad \det(\widetilde{H}_n).$$

Dla większych n (na tablicy: $n = 15$) wartości te mogą mieć nawet przeciwne znaki, co oznacza błąd względny rzędu 100%.

Przykład (układ równań). Rozważmy układ

$$H_n x = b_n, \qquad b_n = H_n \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix},$$

oraz układ zaburzony

$$\widetilde{H}_n \widetilde{x} = \widetilde{b}_n, \qquad \widetilde{b}_n = \mathrm{fl}\left(H_n \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix} \right).$$

W praktyce rozwiązania mogą się istotnie różnić, mimo małej zmiany danych.

Definicja (uwarunkowanie zadania). Zadanie nazywamy *źle uwarunkowanym*, jeśli mała względna zmiana danych powoduje dużą względną zmianę wyniku.

Uwaga.

- Dla zadań źle uwarunkowanych obliczenia komputerowe wymagają szczególnej ostrożności.
- Sprawdzenie, czy zadanie jest źle uwarunkowane, bywa trudne.

Przykład (wartość funkcji). Dla $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ badamy wpływ małej zmiany argumentu $x \to x + h$ na wartość funkcji, np. przez iloraz:

$$\left| \frac{f(x) - f(x+h)}{f(x)} \right|.$$

Korzystając z

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h},$$

otrzymujemy dla małego h:

$$\left| \frac{f(x) - f(x+h)}{f(x)} \right| \approx \left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \right| \frac{|h|}{|f(x)|} \approx |f'(x)| \frac{|h|}{|f(x)|}.$$

Ponieważ

$$\left| \frac{x - (x+h)}{x} \right| = \left| \frac{h}{x} \right|,$$

to

$$\left| \frac{f(x) - f(x+h)}{f(x)} \right| \approx \left| \frac{x f'(x)}{f(x)} \right| \left| \frac{h}{x} \right|.$$

Wielkość

$$\left| \frac{x f'(x)}{f(x)} \right|$$

można zatem przyjąć za miarę tego, jak względna zmiana danych wpływa na względną zmianę wyniku w zadaniu obliczania wartości funkcji.

Przykład (iloczyn skalarny). Rozważmy

$$a = \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n, \qquad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^n,$$

oraz funkcję

$$S(a, b) = \sum_{i=1}^{n} a_i b_i, \qquad S : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}.$$

Niech dane będą względnie zaburzone składowo:

$$\widetilde{a}_i = a_i(1 + \varepsilon_i), \qquad \widetilde{b}_i = b_i(1 + \delta_i),$$

czyli

$$\widetilde{a} = \begin{bmatrix} a_1(1+\varepsilon_1) \\ \vdots \\ a_n(1+\varepsilon_n) \end{bmatrix}, \qquad \widetilde{b} = \begin{bmatrix} b_1(1+\delta_1) \\ \vdots \\ b_n(1+\delta_n) \end{bmatrix}.$$

Wtedy

$$\left|\frac{S(a,b)-S(\widetilde{a},\widetilde{b})}{S(a,b)}\right| = \left|\frac{\sum_{i=1}^n a_ib_i - \sum_{i=1}^n a_ib_i(1+\varepsilon_i)(1+\delta_i)}{\sum_{i=1}^n a_ib_i}\right|$$
$$\approx \left|\frac{\sum_{i=1}^n a_ib_i(\varepsilon_i+\delta_i)}{\sum_{i=1}^n a_ib_i}\right|$$
$$\leq \frac{\sum_{i=1}^n |a_ib_i|\,|\varepsilon_i+\delta_i|}{|\sum_{i=1}^n a_ib_i|}$$
$$\leq \max_i |\varepsilon_i+\delta_i| \frac{\sum_{i=1}^n |a_ib_i|}{|\sum_{i=1}^n a_ib_i|}.$$

Definiujemy wskaźnik:

$$K(a,b) := \frac{\sum_{i=1}^n |a_ib_i|}{|\sum_{i=1}^n a_ib_i|}.$$

Wnioski.

- Jeśli $a_ib_i > 0$ (albo $a_ib_i < 0$) dla wszystkich $i = 1,\ldots,n$, to $K(a,b) = 1$.
- W szczególnych sytuacjach $K(a,b)$ może być dowolnie duże (np. $\sum_i |a_ib_i| = 1$, a $\sum_i a_ib_i \approx 0$).

Definicja (wskaźnik uwarunkowania zadania). Wielkość (lub wielkości), które opisują, jak względna zmiana danych wpływa na względną zmianę wyniku, nazywamy wskaźnikiem (wskaźnikami) uwarunkowania.

Umowa:

- jeśli wskaźnik uwarunkowania jest ograniczony, to zadanie jest dobrze uwarunkowane,
- jeśli jest nieograniczony, to zadanie jest źle uwarunkowane.

Algorytmy numerycznie poprawne.

Definicja (algorytm numerycznie poprawny). Algorytm nazywamy numerycznie poprawnym, jeśli wynik uzyskany w arytmetyce zmiennopozycyjnej może być zinterpretowany jako mało zaburzony wynik dokładny dla mało zaburzonych danych.

Przykład. Niech dane będą liczby $x_1, x_2, \ldots, x_n$ i rozważmy algorytm:

$S := x_1$
for $i = 2$ **to** n
  $S := S + x_i$
return S

Zakładamy, że $x_i = \mathrm{rd}(x_i)$ (dane wejściowe są maszynowe) oraz

$$|\varepsilon_i| \leq 2^{-t} \quad (i = 2,\ldots,n), \qquad \varepsilon_1 := 0.$$

Wtedy

$$\mathrm{fl}(S) = \sum_{i=1}^n x_i \prod_{j=i}^n (1+\varepsilon_j).$$

Wprowadzamy oznaczenie:

$$1 + E_i := \prod_{j=i}^{n} (1 + \varepsilon_j), \qquad i = 2, \ldots, n, \qquad E_1 := E_2.$$

Otrzymujemy

$$\mathrm{fl}(S) = \sum_{i=1}^{n} x_i(1 + E_i) = \sum_{i=1}^{n} \widehat{x}_i, \qquad \widehat{x}_i := x_i(1 + E_i).$$

Z twierdzenia o kumulacji błędów:

$$|E_i| \leq (n - i + 1)\, 2^{-t} \quad (i = 2, \ldots, n), \qquad |E_1| \leq (n - 1)\, 2^{-t}.$$

A więc wynik obliczony jest dokładną sumą lekko zaburzonych danych $\widehat{x}_i$.
Konkluzja. Ten algorytm jest numerycznie poprawny.

Wykład 4 Rozwiązywanie równań nieliniowych

Zadanie: dla danej funkcji $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ znaleźć takie $\alpha \in \mathbb{R}$, dla którego

$$f(\alpha) = 0.$$

W przypadku równań nieliniowych rozwiązanie analityczne najczęściej nie jest możliwe, dlatego stosujemy metody przybliżone (iteracyjne), zwykle z użyciem komputera.

Omówimy trzy podstawowe metody:

- metodę bisekcji,
- metodę Newtona,
- metodę siecznych.

4.1 Metoda bisekcji

Założenia:

- f jest ciągła na przedziale (a_0, b_0),
- istnieje dokładnie jedno miejsce zerowe $\alpha \in (a_0, b_0)$,
- $f(a_0)\, f(b_0) < 0$ (np. $f(a_0) < 0 < f(b_0)$).

Konstrukcja:

- $I_k = [a_k, b_k]$ dla $k = 0, 1, 2, \ldots,$
- środek przedziału $m_{k+1} := \dfrac{a_k + b_k}{2}$,
- jeśli $f(m_{k+1}) = 0$, to $\alpha = m_{k+1}$,
- w przeciwnym razie:

$$I_{k+1} = \begin{cases} [a_k, m_{k+1}], & \text{gdy } f(a_k) f(m_{k+1}) < 0, \\ [m_{k+1}, b_k], & \text{gdy } f(m_{k+1}) f(b_k) < 0. \end{cases}$$

Obserwacje.

- Długość przedziału po k krokach:

$$|I_k| = \frac{b_0 - a_0}{2^k} \xrightarrow[k\to\infty]{} 0.$$

- Metoda bisekcji jest zbieżna i praktycznie niezawodna (dla spełnionych założeń).
- Aby otrzymać przedział długości co najwyżej 2ε, wystarczy wykonać

$$N = \left\lceil \log_2 \left(\frac{b_0 - a_0}{2\varepsilon} \right) \right\rceil$$

kroków (często zapisywane także jako $\lfloor \cdot \rfloor + 1$).

4.2 Metoda Newtona

Punkt startowy x_0 dany, a iteracje:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}, \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Interpretacja geometryczna: x_{n+1} jest miejscem zerowym stycznej do wykresu $y = f(x)$ w punkcie $(x_n, f(x_n))$.

4.3 Metoda siecznych

Punkty startowe x_0, x_1 dane, a iteracje:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)\,(x_n - x_{n-1})}{f(x_n) - f(x_{n-1})}, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

Interpretacja geometryczna: x_{n+1} jest miejscem zerowym prostej przechodzącej przez punkty $(x_n, f(x_n))$ oraz $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$.

Metoda siecznych jest odpowiedzią na wadę metody Newtona polegającą na konieczności liczenia pochodnej.

4.4 Warunki stopu

W praktyce zamiast warunku idealnego $f(\alpha) = 0$ stosuje się kryteria przybliżone:

- mała wartość reszty: $|f(x_n)|$ małe,
- mały krok iteracji (np. względny):

$$\left| \frac{x_n - x_{n-1}}{x_n} \right| \text{ małe},$$

- ograniczenie liczby iteracji: $n \leq N_{\max}$.

4.5 Wykładnik Zbieżności (Rząd Metody)

Niech $x_n \to \alpha$. Mówimy, że ciąg (x_n) ma asymptotyczny rząd zbieżności p, jeśli istnieją $C > 0$ oraz $p \geq 1$ takie, że

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - \alpha|}{|x_n - \alpha|^p} = C.$$

Wtedy (dla dużych n):

$$|x_{n+1} - \alpha| \approx C\,|x_n - \alpha|^p.$$

Przypadki szczególne:

- $p = 1$, $C \in (0, 1)$: zbieżność liniowa,
- $p = 2$: zbieżność kwadratowa,
- $p = 3$: zbieżność sześcienna.

Im większe p, tym szybciej (asymptotycznie) maleje błąd.

Uwaga. Porównywanie metod wyłącznie przez rząd zbieżności ma sens przede wszystkim dla metod jednokrokowych.

4.6 Twierdzenie (metody jednokrokowe)

Niech metoda jednokrokowa ma postać

$$x_0 \text{ dane}, \qquad x_{n+1} = F(x_n), \quad n \geq 0,$$

i niech $x_n \to \alpha$, gdzie α jest miejscem zerowym f.

Wtedy rząd zbieżności p tej metody jest liczbą naturalną i zachodzi równoważność:

$$p \text{ jest rzędem metody} \iff \begin{cases} F(\alpha) = \alpha, \\ F'(\alpha) = F''(\alpha) = \cdots = F^{(p-1)}(\alpha) = 0, \\ F^{(p)}(\alpha) \neq 0. \end{cases}$$

Dodatkowo stała asymptotyczna wynosi

$$C = \frac{|F^{(p)}(\alpha)|}{p!}.$$

Wykład 5 Interpolacja wielomianowa – część I

Powtórka z wykładu 4.

- Bisekcja: rząd zbieżności $p = 1$.
- Newton: rząd zbieżności $p = 2$ (lokalnie, przy spełnionych założeniach).
- Sieczne: rząd zbieżności $p \approx 1.618$.

5.1 Postaci wielomianu

Oznaczenie:

$$\Pi_n := \{w\colon w \text{ jest wielomianem stopnia } \leq n\}.$$

a) Postać naturalna (potęgowa). Dla $w \in \Pi_n$:

$$w(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i.$$

Schemat Hornera.

$$w(x) = (((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \cdots + a_1)x + a_0.$$

Algorytm:

$$\begin{aligned} &w_n := a_n, \\ &w_k := w_{k+1}x + a_k, \quad k = n-1, n-2, \ldots, 0. \end{aligned}$$

Wtedy $w(x) = w_0$. Koszt obliczeniowy: $O(n)$.

b) Postać Newtona. Niech $x_0, x_1, \ldots, x_n$ będą ustalonymi punktami. Wtedy

$$w(x) = \sum_{k=0}^{n} b_k P_k(x),$$

gdzie

$$P_0(x) = 1, \qquad P_k(x) = \prod_{i=0}^{k-1}(x - x_i) \quad (k \geq 1).$$

Czyli:

$$w(x) = b_0 + b_1(x - x_0) + b_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + b_n \prod_{i=0}^{n-1}(x - x_i).$$

Uogólniony schemat Hornera (dla postaci Newtona).

$$\begin{aligned} &w_n := b_n, \\ &w_k := w_{k+1}(x - x_k) + b_k, \quad k = n-1, n-2, \ldots, 0. \end{aligned}$$

Wtedy $w(x) = w_0$.

c) Postać Czebyszewa. Wielomiany Czebyszewa definiujemy rekurencyjnie:

$$T_0(x) = 1, \qquad T_1(x) = x, \qquad T_k(x) = 2xT_{k-1}(x) - T_{k-2}(x) \quad (k \geq 2).$$

Własności (podstawowe).

- $T_k \in \Pi_k \setminus \Pi_{k-1}$.
- Dla $n \geq 1$: $T_n(x) = 2^{n-1}x^n + \ldots$
- Parzystość: $T_n(-x) = (-1)^n T_n(x)$.
- Dla $x \in [-1, 1]$: $T_n(x) = \cos\big(n \arccos(x)\big)$.
- Wszystkie miejsca zerowe T_n są rzeczywiste, pojedyncze i należą do $(-1, 1)$.
- Dla $x \in [-1, 1]$: $|T_n(x)| \leq 1$.
- $\operatorname{lin}\{T_0, T_1, \ldots, T_n\} = \Pi_n$.

Postać Czebyszewa wielomianu:

$$w(x) = \frac{1}{2}c_0T_0(x) + c_1T_1(x) + \cdots + c_nT_n(x) = {\sum_{k=0}^{n}}' c_kT_k(x),$$

gdzie kreska przy sumie oznacza, że składnik dla $k = 0$ jest liczony z czynnikiem $\frac{1}{2}$.

Algorytm Clenshawa (obliczanie wartości w postaci Czebyszewa, koszt $O(n)$):

$$\begin{aligned} &B_{n+2} := 0, \quad B_{n+1} := 0, \\ &B_k := 2xB_{k+1} - B_{k+2} + c_k, \quad k = n, n-1, \ldots, 0. \end{aligned}$$

Wtedy

$$w(x) = \frac{B_0 - B_2}{2}.$$

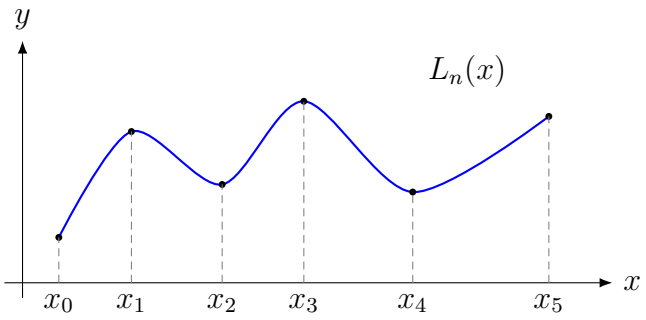
5.2 Interpolacja wielomianowa

Mamy dane pomiary:

$$x_0, x_1, \ldots, x_n \in \mathbb{R}, \quad x_i \neq x_j \ (i \neq j), \qquad y_0, y_1, \ldots, y_n \in \mathbb{R}.$$

Szukamy wielomianu $L_n \in \Pi_n$ takiego, że

$$L_n(x_k) = y_k, \qquad k = 0, 1, \ldots, n.$$



Twierdzenie. Zadanie interpolacyjne Lagrange'a ma zawsze dokładnie jedno rozwiązanie.

Postać Lagrange'a.

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} \lambda_k(x)\, y_k,$$

gdzie

$$\lambda_k(x) := \prod_{\substack{i=0 \\ i\neq k}}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i}, \qquad k = 0, 1, \ldots, n.$$

Własność bazowa:

$$\lambda_k(x_i) = \begin{cases} 1, & i = k, \\ 0, & i \neq k. \end{cases}$$

Przykład. Niech $f(x) = e^x$, $n = 3$, węzły:

$$x_0 = 0, \quad x_1 = 0.2, \quad x_2 = 0.6, \quad x_3 = 0.8.$$

Budujemy L_3 i przybliżamy $f(0.4)$. W zapisie z tablicy:

$$L_3(x) = \lambda_0(x)y_0 + \lambda_1(x)y_1 + \lambda_2(x)y_2 + \lambda_3(x)y_3, \qquad y_k = f(x_k).$$

Otrzymane przybliżenie:

$$L_3(0.4) \approx 1.49142, \qquad f(0.4) \approx 1.49182.$$

Zatem błąd punktowy jest rzędu 10^{-3}.

Przykłady (jak na tablicy).

- $f(x) = \sin(x)$,

  $$x_k = \frac{2k\pi}{n}, \qquad 0 \leq k \leq n, \qquad n = 1, \ldots, 15,$$

  i porównujemy z interpolantem $L_n(x)$.

- $f(x) = |x|$,

  $$x_k = -1 + \frac{2k}{n}, \qquad 0 \leq k \leq n, \qquad n = 1, \ldots, 15,$$

  i obserwujemy jakość przybliżenia przez $L_n(x)$.

- $f(x) = x^6$,

$$x_k = -2 + \frac{4k}{n}, \qquad 0 \le k \le n, \qquad n = 1, \ldots, 6.$$

Ponieważ $f \in \Pi_6$, dla $n \ge 6$ mamy dokładnie

$$L_n(x) = x^6 \quad \text{(w szczególności } L_6(x) = x^6\text{)}.$$

Wykład 6 Interpolacja wielomianowa – część II

Plan wykładu:

- postać Newtona,
- ilorazy różnicowe,
- „dobry" wybór węzłów interpolacji.

Przypomnienie. Dla par parami różnych węzłów $x_0, \ldots, x_n$ oraz danych $y_0, \ldots, y_n$ szukamy $L_n \in \Pi_n$ takiego, że

$$L_n(x_k) = y_k, \qquad 0 \le k \le n.$$

W postaci Lagrange'a:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} y_k \, \lambda_k(x), \qquad \lambda_k(x) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^{n} \frac{x - x_j}{x_k - x_j}.$$

6.1 Postać Newtona wielomianu interpolacyjnego

Niech

$$P_0(x) = 1, \qquad P_k(x) = \prod_{i=0}^{k-1} (x - x_i) \quad (k \ge 1).$$

Szukamy

$$L_n(x) = b_0 P_0(x) + b_1 P_1(x) + \cdots + b_n P_n(x).$$

Współczynniki b_k wyznacza się z warunków interpolacji, co prowadzi do układu trójkątnego (koszt $O(n^2)$).

Wzór jawny (z tablicy):

$$b_k = \sum_{i=0}^{k} \frac{y_i}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{k} (x_i - x_j)}, \qquad k = 0, 1, \ldots, n.$$

6.2 Ilorazy różnicowe

Definicja. Niech $x_0, \ldots, x_n$ będą parami różne i niech $f(x_k) = y_k$. Definiujemy:

$$f[x_i] = f(x_i) = y_i,$$

oraz rekurencyjnie

$$f[x_i, \ldots, x_k] := \frac{f[x_{i+1}, \ldots, x_k] - f[x_i, \ldots, x_{k-1}]}{x_k - x_i}, \qquad i < k.$$

Przykład (rząd 2):

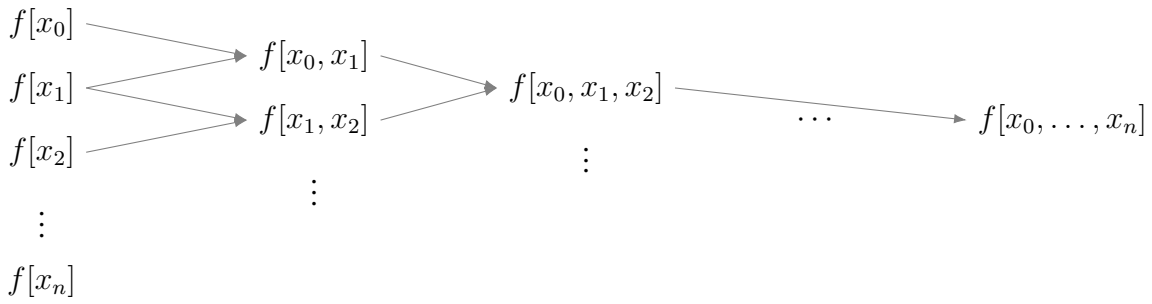
$$f[x_0, x_1, x_2] = \frac{f[x_1, x_2] - f[x_0, x_1]}{x_2 - x_0}.$$

Twierdzenie (postać Newtona przez ilorazy różnicowe).

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f[x_0, x_1, \ldots, x_k]\, P_k(x),$$

czyli

$$b_k = f[x_0, \ldots, x_k].$$



6.3 Koszty i aktualizacja

Koszt jednej konstrukcji:

- tablica ilorazów różnicowych: $O(n^2)$,
- obliczenie $L_n(x)$ dla ustalonego x: $O(n)$ (uogólniony Horner).

Przy wielu punktach $z_0, \ldots, z_M$:

$$\text{koszt} \approx O(n^2) + (M+1)\, O(n),$$

co jest tańsze niż wielokrotne liczenie postaci Lagrange'a od zera.

Jeśli dodamy jedną obserwację (x_{n+1}, y_{n+1}) i mamy zapamiętaną ostatnią kolumnę tablicy ilorazów różnicowych, aktualizacja do L_{n+1} kosztuje $O(n)$.

6.4 Uwagi numeryczne

- Przed budową tablicy ilorazów różnicowych zaleca się uporządkować węzły.
- Naiwny algorytm wypełniania tablicy ilorazów różnicowych nie jest numerycznie poprawny.
- Dla dużej liczby węzłów (na tablicy: rzędu $n \gtrsim 30$) mogą pojawiać się istotne problemy numeryczne.

6.5 Błąd interpolacji i wybór węzłów

Twierdzenie (reszta interpolacji). Jeśli $f \in C^{n+1}([a,b])$, to dla każdego $x \in (a,b)$ istnieje $\xi_x \in (a,b)$ takie, że

$$f(x) - L_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{k=0}^{n} (x - x_k).$$

Stąd oszacowanie:

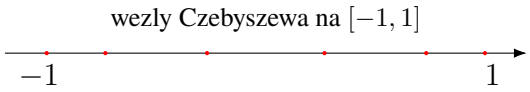
$$\max_{x\in[a,b]} |f(x) - L_n(x)| \leq \max_{x\in[a,b]} \left| \frac{f^{(n+1)}(x)}{(n+1)!} \right| \cdot \max_{x\in[a,b]} \left| \prod_{k=0}^{n} (x - x_k) \right|.$$

Żeby zmniejszyć błąd, chcemy minimalizować

$$\max_{x\in[a,b]} \left| \prod_{k=0}^{n} (x - x_k) \right|.$$

Fakt. Dla $[a,b] = [-1,1]$ minimum osiągają węzły Czebyszewa:

$$x_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right), \qquad 0 \leq k \leq n.$$



Dla ogólnego przedziału $[a,b]$ stosujemy przeskalowanie:

$$t_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right), \qquad 0 \leq k \leq n.$$