Συνοπτικές Σημειώσεις - Υπολογιστική Φυσική
Πετρίδης Κ. - Ε.Κ.Π.Α

1 Εισαγωγή

Αυτές οι σημειώσεις αποτελούν προσωπικές, συνοπτικές σημειώσεις για το μάθημα της Υπολογιστικής Φυσικής. Ενδεχομένως να υπάρχουν λάθη και παραλήψεις, τις οποίες θα με χαροποιούσε να μου τις επισημάνετε μέσο email στο costpetrides@icloud.com

Επομένως οι σημειώσεις αυτές, σε καμία περίπτωση δεν μπορούν να αντικαταστήσουν τις σημειώσεις των διαλέξεων ή ακόμη και την παρακολούθηση του. Προσωπικά θεωρώ ότι το μάθημα της Υπολογιστικής Φυσικής είναι από τα πιο ενδιαφέρον μαθήματα του τμήματος μας.

Προσωπικά σας συνιστώ να παρακολουθήσετε τις διαλέξεις του μαθήματος και να επισκεφτείτε το Github repository του Καθ. Κωνσταντίνου Θεοφιλάτου. Σε αυτό μπορείτε να βρείτε εξαιρετικά προγράμματα και ασκήσεις (Αξίζει να τα φτιάξετε και να τα ”τρέξετε” μόνοι σας).

Περιεχόμενα

2 Στατιστική Ανάλυση

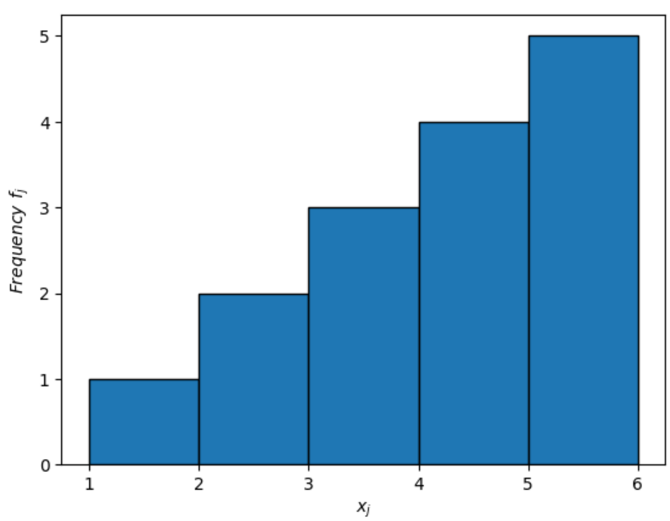
Ως φυσικοί, συχνά χρειάζεται να επεξεργαζόμαστε και να αναλύουμε τα δεδομένα μας. Αυτό είναι μια διαδικασία άρικτα συνδεδεμένη με την επιστίμη μας! Για την μελέτη των δεδομένων μας, συχνά καταφεύγουμε στην δημιουργεία ενός ιστογράμματος, ώστε να μελετήσουμε την συμπεριφορά τους.

Το ιστόγραμμα αποτελεί μια γραφική απεικόνιση στατιστικών συχνοτήτων των περιοχών τιμών ενός μεγέθους. Η επιφάνεια κάθε ορθογωνίου είναι μέτρο της συχνότητας εμφάνισης της συγκεκριμένης περιοχής τιμών ενώ το ύψος του ισούται με το λόγο της συχνότητας προς το εύρος των τιμών που αντιπροσωπεύει το ορθογώνιο.

Για παράδειγμα το σύνολο,

$$X = [1, 2, 2, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 4, 5, 5, 5, 5, 5]$$

μπορεί να απεικονιστεί με τον ποιο κάτω τρόπο.



Τα σημαντικότερα στατιστικά μεγέθη, για την μελέτη ενός συνόλου είναι τα ακόλουθα.

1. **Μέση τιμή:**
$$\mu = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N} x_i = \frac{1}{N}\sum_{j} f_j \cdot x_j \tag{1}$$

2. **Διασπορά:**
$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N}\sum_{i}^{N}(x_i - \mu)^2 \tag{2}$$

3. **Τυπική Απόκλιση:**
$$\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i}^{N}(x_i - \mu)^2} \tag{3}$$

Στην περίπτωση που μελετάμε ένα δείγμα (sample), μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε την διόρθωση Bessel. Συνοπτικά, η διόρθωση Bessel είναι μια στατιστική προσαρμογή που χρησιμοποιείται για τη διόρθωση της προκατάληψης στην εκτίμηση της διακύμανσης του δείγματος. Επομένως η *Σχέση 2* γράφεται ως,

$$s_x^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i}^{N}(x_i - \mu)^2 \tag{4}$$

ενώς η *Σχέση 3* ως,

$$s_x = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i}^{N}(x_i - \mu)^2} \tag{5}$$

Παράδειγμα 1:

Για το πιο κάτω σύνολο υπολογίστε:

$$X = [1, 2, 2, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 4, 5, 5, 5, 5, 5]$$

i. Μέση τιμή μ
ii. Διασπορά σ_x^2
iii. Τυπκή απόκλιση σ_x

Λύση

3 Ψευδοτυχαίοι Αριθμοί

Η παραγωγή "ψευδοτυχαίων" αριθμών αποτελεί ένα χρήσιμο εργαλείο. Η χρίση τους είναι απαραίτητη στις μεθόδους Monte Carlo, τις οποίες θα δούμε αργότερα (The fun part..!!!).

Η παραγωγή των ψευδοτυχαίων" αριθμών θα γίνει με τις εξίς μεθόδους,

- LCG (Linear congruential generator)
- Inverse transform sampling*
- Hit or Miss*

* Με αυτές τις μεθόδους, μπορούμε να πράξουμε τυχαίους αριθμούς επιθυμητής κατανομής!

3.1 Linear congruential generator

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στην σχέση,

$$x_{n+1} = (a \cdot x_n + c) \bmod m \tag{6}$$

όπου α: ο πολλαπλασιαστής, m: ο διαιρέτης, c: η αύξηση και x_o: η αρχική τιμή. Η πράξη mod, μας επιστρέφει το υπόλοιπο της διαίρεσης.

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζω τις σταθερές α,c και m

Βήμα 2. Ορίζω N (σύνολο ψευδοτυχαίων αριθμών) και την αρχική τιμή x_o

Βήμα 3. Εκτελών την επαναληπτική *Σχέση 6* (σε Loop!)

Η μέθοδος αυτή μπορεί να εμφανίσει δύο βασικά προβλήματα. Σταθερές τιμές ή ακόμη και επαναληψιμότητα.

Παράδειγμα 2.

Φτιάξτε ένα πρόγραμμα το οποίο να παράγει "τυχαίους αριθμούς" με την μέθο LCG για:

i. a =1103515245, c = 12345, m =231, $x_o = 2$

ii. a =1103515245, c = 12345, m =2^{31}, $x_o = 2$

Λύση

3.2 Inverse transform sampling

Η δειγματοληψία αντίστροφου μετασχηματισμού είναι μια μέθοδος για τη δημιουργία "τυχαίων" αριθμών από οποιαδήποτε κατανομή πιθανότητας χρησιμοποιώντας την αντίστροφη αθροιστική κατανομή $F^{-1}(x)$. Το μόνο που χρειάζεται να διαθέτουμε είναι μία τιμή που έχει παραχθεί ομοιόμορφα στο διάστημα [0,1] και την αντίστροφη αθροιστική κατανομή $F^{-1}(x)$.

Πρόταση: *Έστω $\mathbb{F} : \mathbb{R} \to$ [0,1] συνάρτηση κατανομής που είναι συνεχής και γνησίως αύξουσα στο $I = \{\in R : F(x) \in (0,1)\}$. Αν $U \sim$ Unif(0,1), τότε X= $F^{-1}(U) \sim F$*

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Παράγουμε έναν τυχαίο αριθμό U$\sim$ [0,1]

Βήμα 2. Υπολογίζουμε τον τυχαίο αριθμό μέσο της σχέσης X=$F^{-1}(U)$

Για να εκτελέσουμε κάτι τέτοιο πρέπει να υπολογίσουμε αρχικά την αντίστροφη αθροιστική κατανομή. Ας δούμε ένα απλό παράδειγμα.

Παράδειγμα 3.

Δημιουργείστε "τυχαίους" αριθμούς μέ την εξής κατανομή:

$$X \sim e^x \quad \in [0,5]$$

Λύση:

Αρχικά κανονικοποιούμε την συνάρτηση μας μέσω σταθεράς κανονικοποίησης c:

$$\int_0^5 c \cdot e^x dx = 1 \Rightarrow c = \frac{1}{e^5 - 1}$$

Υπολογίζουμε την αθροιστική κατανομή:

$$F(x) = \int_0^x \frac{e^t}{e^5 - 1} dt = \frac{e^x - 1}{e^5 - 1}$$

Θέτουμε F(x) $\to$ u και x $\to$ X στην F(x):

$$u(e^5 - 1) = e^X - 1 \Rightarrow e^X = 1 + u(e^5 - 1)$$

$$\Rightarrow F^{-1}(U) = X = log\left(1 + u(e^5 - 1)\right) \quad *$$

* Γεννήτρια τυχαίων αριθμών με κατανομή $e^x \in [0,5]$. Το μόνο που χρειάζεται είναι να δώσετε ένα τυχαίο αριθμό u $\in$ [0,1] !!!

Λύση

3.3 Hit or Miss

Με την μέθοδο Hit or Miss ή Accept - Reject, μπορούμε να παράξουμε ψευδοτυχαίους αριθμούς που ακολουθούν μία συγκεκριμένη κατανομή. Όπως και με την μέθοδο του αντίστροφου μετασχηματισμού.

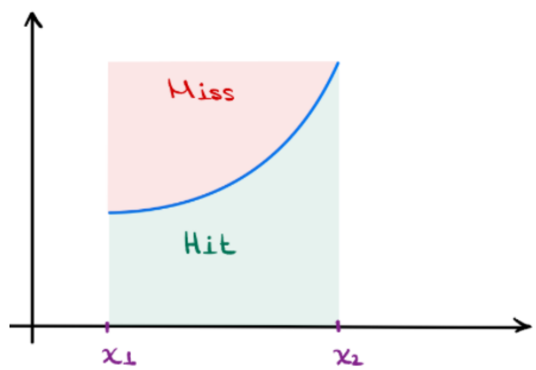
Η διαφορά έγκειται στο γεγονός ότι δεν παράγουμε τυχαίους αριθμούς μέσο μιας κατανομής αλλά αποδεχόμαστε αυτούς που την ικανοποιούν. Έστω ότι θέλουμε να παράξουμε τυχαίους αριθμούς που ακολουθούν την κατανομή f(x).

Έστω ένα τυχαίο ζεύγος $(x_i, y_i) \in [a, b] \times [0, f_{max}]$. Εάν ικανοποιεί την πιο κάτω συνθήκη, κρατάμε το x_i !!

$$y_i \leq f(x_i)$$

Προσοχή:

- $x_i \sim Unif(a, b)$
- $y_i \sim Unif(0, f_{max})$



! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Παράγουμε ένα τυχαίο αριθμό $x_i \sim Unif(a, b)$

Βήμα 2. Παράγουμε ένα τυχαίο αριθμό $y_i \sim Unif(0, f_{max})$

Βήμα 3. Κκρατάμε το x_i που ικανοποιεί την σχέση $y_i \leq f(x_i)$ *Hit!*

Αρχικά θα πρέπει να κανονικοποιήσουμε την f(x) και να βρούμε το f_{max}.

Παράδειγμα 4.

Δημιουργείστε "τυχαίους" αριθμούς μέ την εξής κατανομή με την μέθοδο Hit or Miss:

$$X \sim e^x \quad \in [0, 5]$$

Λύση:

Αρχικά κανονικοποιούμε την συνάρτηση μας μέσω σταθεράς κανονικοποίησης c:

$$\int_0^5 c \cdot e^x dx = 1 \Rightarrow c = \frac{1}{e^5 - 1}$$

$$\Rightarrow f(x) = \frac{e^x}{e^x - 1}$$

Υπολογίζω το f_{max} για x $\in [0, 5]$:

$$\Rightarrow f_{max} = \frac{e^5}{e^5 - 1}$$

Επομένως, θα πρέπει να παράξουμε τυχαίους αριθμούς

- $x_i \sim Unif(0, 5)$
- $y_i \sim Unif(0, f_{max})$

Θα κρατήσουμε το x_i που ικανοποιεί την σχέση $y_i \leq f(x_i)$

Λύση

4 Εύρεση ρίζας

Με τη χρήση αριθμητικών μεθόδων επιτυγχάνεται ο προσεγγιστικός εντοπισμός των ριζών μιας μη γραμμικής εξίσωσης f(x)=0.

Για τις βασικές αριθμητικές μεθόδους που θα μελετήσουμε υποθέτουμε ότι γνωρίζουμε ένα διάστημα [a, b] εντός του οποίου βρίσκεται η μοναδική ρίζα ξ.

Για την αριθμητική επίλυση των μή Γραμμικών Εξισώσεων θα δούμε τις εξής μεθόδους:

- Επαναληπτικές Μέθοδοι διαστημάτων (Παρενθετικές)
  1. Μέθοδος Διχοτόμησης - Bisection
  2. Μέθοδος Εσφαλμένης Θέσης -Regula Falsi
- Επαναληπτικές Μέθοδοι Σημείου
  3. Newton-Raphson
  4. Τέμνουσας -Secant
  5. Σταθερού Σημείου -Fixed Point

4.1 Επαναληπτικές Μέθοδοι διαστημάτων (Παρενθετικές)

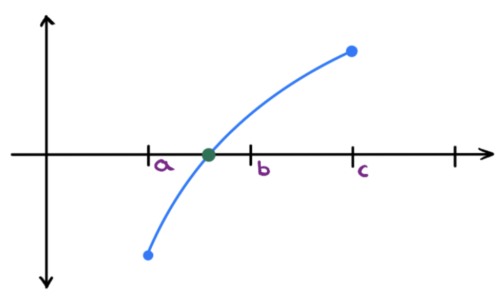
- Μέθοδος Διχοτόμησης - Bisection
- Μέθοδος Εσφαλμένης Θέσης -Regula Falsi

Από την Ανάλυση είναι γνωστό το εξής, αγαπημένο θεώρημα ...

Θεώρημα - Bolzano : *Έστω $\alpha, b \in \mathbb{R}$, $\alpha < b$ και $f(x) : [a, b] \to \mathbb{R}$ είναι μία συνεχής συνάρτηση στο κλειστό διάστημα [a,b], με $f(\alpha) \cdot f(b) < 0$. Τότε, υπάρχει μία τουλάχιστον ρίζα ξ , της εξίσωσης f(ξ)=0 στο ανοικτό διάστημα (a,b).*

4.1.1 Μέθοδος Διχοτόμησης - Bisection

Η μέθοδος διχοτόμησης (Bisection) βασίζεται στο Θεώρημα Bolzano. Διαιρεί διαδοχικά το διάστημα [a, b] λαμβάνοντας κάθε φορά εκείνο το διάστημα που περιέχει τη ρίζα.



! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζεται το μέσο του διαστήματος

$$c = \frac{a+b}{2}$$

Βήμα 2. Είναι $| f(c) |= 0$?

Ναι: Η ρίζα είναι ξ=c

Διαφορετικά: Αν $f(a) \cdot f(c) < 0$ τότε

b=c

Διαφορετικά: Αν $f(b) \cdot f(c) < 0$ τότε

a=c

Βήμα 3: Εκτελούμε το *Βήμα 1* και *Βήμα 2*, μέχρι να ικανοποιηθεί ένα από τα ακόλουθα κριτήρια:

i. $| f(c) |< \delta$

ii. $| c - \xi |< \varepsilon$

iii. $| f(c) |< \delta$ και $| c - \xi |< \varepsilon$

Το σφάλμα στη μέθοδο της Διχοτόμησης:

$$| \xi - c_n | = | \xi - \frac{a_n + b_n}{2} | \leq \frac{a_n + b_n}{2}$$

ή

$$| \xi - c_n | \leq \frac{b_o + a_o}{2^{n+1}}$$

Για δεδομένο ε > 0, η απαίτηση

$$| \xi - c_n | \leq \varepsilon$$

παίρνει την μορφή,

$$\frac{b_o - a_o}{2^{n+1}} \leq \varepsilon$$

επομένως μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμό επαναλήψεων για δοσμένο ε, μέσο της σχέσης

$$n \geq \frac{log(b_o - a_o) - log(2\varepsilon)}{log(2)}$$

Ο ανωτέρω τύπος για δεδομένο ε δίνει ένα φράγμα του αριθμού επαναλήψεων n που απαιτούνται για τη σύγκλιση της μεθόδου της ιχοτόμησης που συνήθως είναι πολύ μεγαλύτερο από τον πραγματικό αριθμό επαναλήψεων.

Παράδειγμα 5.

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 1$, η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα (1,2). Να εφαρμοστούν τέσσερις επαναλήψεις της μεθόδου της διχοτόμησης. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $| f(c) | < 1.10^{-6}$.

Λύση:

1η επανάληψη:

Για την πρώτη επανάληψη έχουμε (a,b) = (1,2) με $f(a) < 0$ και $f(b) > 0$. Το μέσο του πρώτου διαστήματος και η πρώτη προσέγγιση για τη ρίζα είναι,

$$c_o = \frac{a_o + b_o}{2} = 1.5$$

Προκειμένου να εξεταστεί αν η ρίζα περιέχεται στο (a_o, c_o) = (1, 1.5) ή στο (c_o, b_o)= (1.5,2) υπολογίζεται η

$$f(c_o) = 2.375 > 0$$

Αφού τα $f(a_o)$ και $f(c_o)$ έχουν αντίθετο πρόσημο, σύμφωνα με το Θεώρημα Bolzano η ρίζα βρίσκεται μεταξύ των a και c. Επομένως, θέτουμε b=c=1.5 και το νέο διάστημα είναι το $(a_1, b_1) = (a_0, b_0) = (1, 1.5)$

2η επανάληψη:

Το μέσο του νέου διαστήματος καθώς και η δεύτερη προσέγγιση για τη ρίζα είναι

$$c_1 = \frac{a_1 + b_1}{2} = \frac{1 + 1.5}{2} = 1.25$$

Επομένως το

$$f(c_1) \approx 0.328 > 0$$

το οποίο έχει αντίθετο πρόσημο από το $f(a_1)$. Επομένως, σύμφωνα με το Θεώρημα Bolzano η ρίζα βρίσκεται μεταξύ των a_1 και c_1. Δηλαδή, το νέο διάστημα θα είναι το $(a_2, b_2) = (a_1, b_1) = (1, 1.25)$.

3η επανάληψη:

Στην τρίτη επανάληψη, υπολογίζεται το

$$c_2 = \frac{a_2 + b_2}{2} = \frac{1 + 1.25}{2} = 1.125$$

και

$$f(c_2) \approx -0.420 > 0$$

Σε αυτή την επανάληψη βρέθηκε ότι οι $f(a_2)$ και $f(c_2)$ έχουν το ίδιο πρόσημο, το οποίο δηλώνει ότι η ρίζα πρέπει να βρίσκεται μεταξύ των c_2 και b_2.

4η επανάληψη:

Στην τέταρτη επανάληψη, ισχύει ότι $(a_3, b_3) = (a_2, b_2) = (1.125, 1.25)$ και

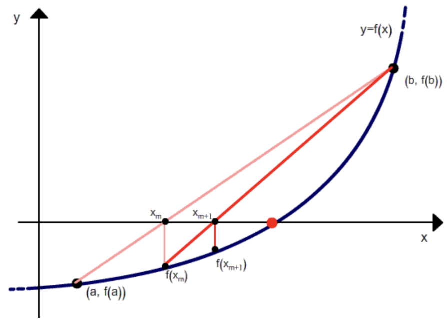
$$c_3 = \frac{a_3 + b_3}{2} = 1.1875.$$

Λύση

4.1.2 Μέθοδος Εσφαλμένης Θέσης -Regula Falsi

Η μέθοδος της εσφαλμένης θέσης έχει την ίδια φιλοσοφία με τη μέθοδο της Διχοτόμησης με τη μόνη διαφορά ότι ο τρόπος υπολογισμού του c είναι διαφορετικός. Η μέθοδος αυτή αναπτύχθηκε γιατί η μέθοδος της ιχοτόμησης συγκλίνει αρκετά αργά. Ισχύουν συνεπώς οι ίδιες υποθέσεις όπως στη μέθοδο της ιχοτόμησης.

Μια καλύτερη προσέγγιση της ξ, από το μέσο του διαστήματος, είναι ότι το σημείο x_0 όπου η ευθεία που διέρχεται από τα σημεία (a, f (a)) και (b, f (b)) τέμνει τον άξονα των x



Η κλίση δίνεται από την σχέση

$$m = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$$

Εφαρμόζοντας τα σημεία (c,0) και (b,f(b)) η κλίση είναι,

$$m = \frac{0 - f(b)}{c - b}$$

εξισώνοντας τις δύο αυτές σχέσεις παίρνουμε,

$$\frac{0 - f(b)}{c - b} = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}$$

επομένως υπολογίζουμε το c θα δίνεται από την σχέση

$$c = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζεται το μέσο του διαστήματος

$$c = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$

Βήμα 2. Είναι $\mid f(c) \mid= 0$?

Ναι: Η ρίζα είναι ξ=c

Διαφορετικά: Αν $f(a) \cdot f(c) < 0$ τότε

b=c

Διαφορετικά: Αν $f(b) \cdot f(c) < 0$ τότε

a=c

Βήμα 3: Εκτελούμε το *Βήμα 1* και *Βήμα 2*, μέχρι να ικανοποιηθεί ένα από τα ακόλουθα κριτήρια:

i. $\mid f(c) \mid< \delta$

ii. $\mid c - \xi \mid< \varepsilon$

iii. $\mid f(c) \mid< \delta$ και $\mid c - \xi \mid< \varepsilon$

Παράδειγμα 6.

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 1$, η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα (1,2). Να εφαρμοστούν δύο επαναλήψεις της μεθόδου της Εσφαλμένης Θέσης. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $\mid f(c) \mid <$ 1.10⁻⁶.

Λύση:

1η επανάληψη:

Έχουμε $(a_0, x_0) = (1{,}2)$ με $f(a) = 1 < 0$ και $f(b) = 9 > 0$. Η πρώτη προσέγγιση της ρίζας είναι,

$$c = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)} = \frac{1 \cdot 9 - 2 \cdot (-1)}{9 - (-1)} = 1.1$$

Προκειμένου να εξεταστεί αν η ρίζα περιέχεται στο $(a_0, x_0) = (1,\ 1.1)$ ή στο $(a_0, x_0) = (1.1,\ 2)$ υπολογίζεται η

$$f(c) = 0.549 < 0.$$

Αφού οι $f(a_0)$ και $f(c)$ έχουν το ίδιο πρόσημο, σύμφωνα με το Θεώρημα Bolzano η ρίζα βρίσκεται μεταξύ των c και b_0.

2η επανάληψη:

Επομένως, στην επόμενη επανάληψη το νέο διάστημα μας θα είναι $(a_1, b_1) = (c, b_0) = (1.1,\ 2)$. Η δεύτερη προσέγγιση για τη ρίζα είναι,

$$c = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)} = 1.151743638.$$

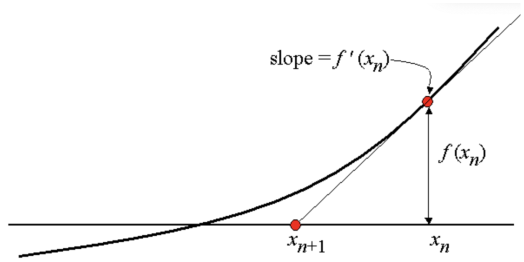
κτλ..

Λύση

4.2 Επαναληπτικές Μέθοδοι Σημείου

- Newton-Raphson
- Τέμνουσας -Secant
- Σταθερού Σημείου -Fixed Point

4.2.1 Newton-Raphson



Έστω $x_n \in$ [a,b] μια προσέγγιση στην ρίζα ξ τέτοια ώστε $f'(x_n) = 0$ με το $\mid x_n - \xi \mid$ να είναι μικρό. Το πολυώνυμο του Taylor, δευτέρου βαθμού για την f(x) γύρω από το x_n είνια:

$$0 \approx f(x_n) + (\xi x_n) f'(x_n)$$

ή

$$\xi \approx x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Επομένως η επαναληπτική σχέση για εύρεση της ρίζας είναι,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζουμε την παράγωγο $f'(x)$ της συνάρτησης.

Βήμα 2. Για αρχική τιμή x_o, επιλέγουμε το σημείο α ή b το οποί ικανοποιά την σχέση

$$f'(x) \cdot f(x) > 0$$

Βήμα 3. Έχοντας επιλέηει την αρχική τιμή x_o, εκτελούμε την πιο κάτω αναδρομική σχέση μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης $\mid f(x_{n+1}) \mid < 0$,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Παράδειγμα 7

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^4 - 4x^3 + 4x^2 + x - 4$, η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα (2,3). Να εφαρμοστούν δύο επαναλήψεις της μεθόδου Newton-Raphson. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $\mid f(c) \mid < 1.10^{-6}$.

Λύση:

$$f'(x) = 4x^3 - 12x^2 + 8x + 1$$

Για x=2: $f(2) \cdot f'(2) < 0$

Για x=3: $f(3) \cdot f'(3) > 0$

Επομένως, θέτουμε $x_0 = 2$

1η επανάληψη:

$$x_1 = x_o - \frac{f(x_o)}{f'(x_o)} = 3 - \frac{f(3)}{f'(3)} = 2.68$$

2η επανάληψη:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 2.68 - \frac{f(2.68)}{f'(2.68)} = 2.5289308$$

Λύση

4.2.2 Τέμνουσας - Secant

Γενικά η μέθοδος του Newton-Raphson συγκλίνει ταχύτερα από τις παρενθετικές μεθόδους αλλά έχει σοβαρά μειονεκτήματα, όπως πόσο κοντά πρέπει να διαλέξουμε το x_0 στο ξ και η ανάγκη του υπολογισμού της $f'(x_n)$ για κάθε n.

Η μέθοδος της τέμνουσας είναι η ενδιάμεση λύση μεταξύ των παρενθετικών μεθόδων και της μεθόδου N-R. Αντικαθιστώντας στη μέθοδο Newton-Raphson την $f'(x_n)$ με το πηλίκο,

$$f'(x_n) \rightarrow \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}$$

προκύπτει η μέθοδος της Τέμνουσας.

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζουμε την παράγωγο $f'(x)$ της συνάρτησης.

Βήμα 2. Για αρχική τιμή x_o, επιλέγουμε το σημείο α ή b το οποί ικανοποιεί την σχέση

$$f'(x) \cdot f(x) > 0$$

Βήμα 3. Έχοντας επιλέξει την αρχική τιμή x_o, εκτελούμε την πιο κάτω αναδρομική σχέση μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης $\mid f(x_{n+1}) \mid < 0$,

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \cdot \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}$$

Παράδειγμα 8

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 1$, η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα (1,2). Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $| f(c) |< 1.10^{-6}$.

Λύση

4.2.3 Σταθερού Σημείου - Fixed Point

Η μέθοδος του σταθερού σημείου, βασίζεται στον σχηματισμό βοηθητικής συνάρτησης g(x):

$$\xi = g(\xi)$$

δηλαδή, η ρίζα ξ της f(x) να είναι σταθερό σημείο της g(x). Ο μετασχηματισμός πραγματοποιείται με τον εξής τρόπο,

$$f(x) = 0 \Rightarrow x = g(x)$$

όπου

$$g(x) = x - f(x)$$

Προσοχή: Ο ορισμός της g (x) δεν είναι μονοσήμαντα ορισμένος.

Παράδειγμα 9

Για την $f(x) = x^2 - x - 2$, βρείτε την βοηθητική συνάρτηση g(x).

Λύση:

Μπορούμε να θέσουμε,

$g(x) = x^2 - 2$

$g(x) = \sqrt{x+2}$

$g(x) = 1 - \frac{2}{x}$

Ποιό θα επιλέξω ως αναδρομική σχέση..;
Κριτήρια Σύγκλισης:

1. Υπάρχει [a, b] στο οποίο ορίζεται η g(x) και g(x) ∈ [a,b]:

$$g : [a, b] \rightarrow [a, b]$$

2. g(x) συνεχής στο [a,b]

3. Παραγωγίσιμη και να υπάρχει k < 1:

$$\forall x \in [a, b], | g'(x) | \leq k \leq 1$$

Αν ισχύουν οι 3 παραπάνω προϋποθέσεις, τότε στο διάστημα [a,b] υπάρχει ακριβώς ένα σταθερό σημείο m της g, και η μέθοδος σταθερού σημείου συγκλίνει σε αυτό το m!

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζουμε την βοηθητική συνάρτηση που ικανοποιεί τα τρία κριτήρια

$$x = g(x)$$

Βήμα 2. Έχοντας επιλέξει την αρχική τιμή x_o, εκτελούμε την πιο κάτω επαναληπτική σχέση μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης $\mid f(x_{n+1}) \mid < 0$,

$$x_{n+1} = g(x_n)$$

Παράδειγμα 10

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^3 + 2x - 1$, η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα $(0, \frac{1}{2})$. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα με την μέθοδο σταθερού σημείου. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $\mid f(c) \mid < 1.10^{-6}$.

$$f(0) = -1 \ , \ f(\frac{1}{2}) = \frac{1}{8} \ \Rightarrow \ f(0) \cdot f(\frac{1}{2}) < 0$$
$$f'(x) = 3x^2 + 2 > 0$$

Αυτά εξασφαλίζουν την μοναδικότητα της λύσης στο χωρίο μελέτης μας!

Εύρεση βοηθητικής συνάρτησης,

$$x = g(x) \ \Rightarrow \ f(x) = 0$$

$$g(x) = \frac{1}{2}(1 - x^3)$$

Θα δουλέψει; Για να απαντήσουμε σε αυτό, θα ελέγξουμε τα κριτήρια σύγκλισης που παρουσιάστηκαν πιο πάνω.

Τα δύο πρώτα κριτήρια είναι εύκολο να δούμε ότι ικανοποιούνται. Πάμε να μελετήσουμε το τρίτο!

$$g'(x) = \frac{-3}{2}x^2 \ \rightarrow \ \mid g'(x) \mid \leq \ \frac{3}{2}x^2 \ \leq \ \frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{3}{8} < 1$$

Αναμένουμε να δουλέψει!!

Λύση

Εκτίμιση σφάλματος:

Από τα κριτήρια σύγκλισης έχουμε,

$$\forall x \in [a,b], \mid g'(x) \mid \leq k \leq 1$$

όπου το k δίνεται από την σχέση,

$$k = max \mid g'(x) \mid \leq 1, \quad \forall \ x \in [a,b] \tag{7}$$

Εύκολα διαπιστώνουμε ότι η πιο κάτω σχέση είναι αληθής (επαναληπτικό σχήμα).

$$\mid c - x_{n+1} \mid \leq \lambda \mid c - x_n \mid \tag{8}$$

Επομένως από τις πιο πάνω σχέσεις καταλήγουμε στην ακόλουθη,

$$\mid c - x_n \mid \leq \frac{\lambda^n}{1-\lambda} \mid x_1 - x_o \mid \tag{9}$$

όπου, n: ο αριθμός επαναλήψεων.

5 Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases}$$

Για την επίλυση γραμμικών συστημάτων μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δύο είδη μεθόδων:

- Ακριβείς Μεθόδους
- Επαναληπτικές Μεθόδους

5.1 Ακριβείς Μεθόδους

- Απαλοιφή Gauss
- Μέθοδος LU

5.1.1 Απαλοιφή Gauss

Για την απαλοιφή Gauss, εκτελούμε τις στοιχειώδεις πράξεις στον επαυξημένο πίνακα:

1. Ανταλλαγή δύο γραμμών R_i και R_j:

$$R_i \leftarrow R_j$$

2. Πολλαπλασιασμός γραμμής R_i με μια σταθερά $\alpha \in \mathbb{R}$:

$$R_i \leftarrow \alpha \cdot R_i$$

3. Πρόσθεση σε μια γραμμή R_i το γινόμενο της γραμμής R_j με μια σταθερά $\alpha \in \mathbb{R}$:

$$R_i \leftarrow R_i + \alpha \cdot R_j$$

και προσπαθώ να τον φέρω σε κλιμακωτή μορφή, εκτελώντας τις παραπάνω γραμμοπράξεις.

Παράδειγμα 11

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Να το φέρετε σε κλιμακωτή μορφή και να βρείτε την λύση αναλυτικά .. με πράξεις!!

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \end{array}\right]$$

Λύση:

$$\begin{array}{c} R_2 \leftarrow R_2 - R_1 \\ R_3 \leftarrow R_2 - 2R_1 \end{array} \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & -1 & 0 & -2 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \end{array}\right]$$

$$R_2 \leftarrow -R_2 \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \end{array}\right]$$

$$R_3 \leftarrow R_3 + 5R_2 \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 9 \end{array}\right]$$

$$R_3 \leftarrow \tfrac{1}{3}R_2 \quad \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{array}\right]$$

Επομένως η λύση είναι $(x, y, z) = (1, 2, 3)^T$

Ο αλγόριθμος για την απαλοιφή Gauss είναι,

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζουμε τους πίνακας A, b και υπολογίζουμε τον επαυξημένο πίνακα C=(A|b) και την διάσταση του.

$$C = np.concatenate((A, b), axis = 1) \quad \#Python$$

$$(n, m) = C.shape \quad \#Python$$

Βήμα 2. Elimination

Για κάθε $i \to n$:

Για κάθε $j \to n$:

Για $i \neq j$:

$$ratio = \frac{C_{ji}}{C_{ii}}$$

Για κάθε $k \to m$:

$$C_{jk} = C_{jk} - ratio * C_{ik}$$

Βήμα 3. Obtaining the solution

Για κάθε $i \to n$:

$$x_i = \frac{C_{in}}{C_{ii}}$$

Παράδειγμα 12

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει την λύση του προβλήματος με την μέθοδο απαλοιφής Gauss.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \end{array}\right]$$

Λύση

5.1.2 Μέθοδος Doolittle-Crout (LU)

Ένα γραμμικο σύστημα $A \cdot x = b$,

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

μπορεί να γραφτεί ως $L \cdot U \cdot x = b$,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{23} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

Για να διευκολύνουμε τη λύση της, αυθαίρετα θεωρούμε $l_{11} = l_{22} = l_{33} = 1$.

Για συστήματα 3x3:

$$u_{11} = a_{11}, \quad u_{12} = a_{21}, \quad u_{13} = a_{31}$$

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}}, \quad l_{31} = \frac{a_{31}}{u_{11}}$$

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}, \quad u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}$$

$$l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}u_{12}}{u_{22}}$$

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}$$

Προσοχή: Στόχος μας είναι, να φτιάξουμε ένα πρόγραμμα το οποίο να υπολογίζει τους πίνακες L (lowe) και U (Upper)! Πώς υπολογίζουμε την λύση;

Μέσω εμπρός αντικατάσταση, υπολογίζουμε το y,

$$L \cdot y = b \tag{10}$$

και την λύση μέσο της σχέσης,

$$U \cdot x = y \tag{11}$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζω τους πίνακες A, L και U:

$$U = A.copy() \;\; \#Python$$

$$L = np.identity(n) \;\; \#Python$$

Βήμα 2. Για κάθε $k \rightarrow n-1$:

Για κάθε $j \rightarrow (k+1, n)$:

$$Ljk = \frac{U_{jk}}{U_{kk}}$$

$$U_{[j][k:n]} = U_{[j][k:n]} - L_{[j][k]} * U_{[k][k:n]}$$

Παράδειγμα 13

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει τους πίνακες L και U και μέσω αυτόν υπολογίστε την λύση του συστήματος με την μέθοδο Gauss (λύνοντας την *Σχέση 7* και *Σχέση 8*).

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 3 & -1 & 6 \\ 3 & 5 & 3 & 4 \end{array}\right]$$

Λύση

5.2 Επαναληπτικές Μεθόδους

- Μέθοδος Jacobi
- Μέθοδος Gauss-Seidel

5.2.1 Μέθοδος Jacobi

Η ιδέα είναι, αν έχουμε μία προσέγγιση $x^{(k)}$ για τη λύση του συστήματος, να βρούμε έναν τρόπο να αποκτήσουμε μία καλύτερη προσέγγιση$x^{(k+1)}$. Επομένως, αναζητούμε μια ακολουθεία $x^{(k)}$ που να συγκλίνει στην πραγματική λύση.

Σε ένα σύστημα 3x3:

$$\begin{aligned} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + a_{13} \cdot x_3 = b_1 \\ a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + a_{23} \cdot x_3 = b_2 \\ a_{31} \cdot x_1 + a_{32} \cdot x_2 + a_{33} \cdot x_3 = b_3 \end{aligned}$$

Λύνω ως προς x_1, x_2, x_3 την 1^η, 2^η και 3^η εξίσωση αντίστοιχα:

$$x_1 = \frac{1}{a_{11}}\left(b_1 - a_{12}\cdot x_2 - a_{13}\cdot x_3\right)$$

$$x_2 = \frac{1}{a_{22}}\left(b_2 - a_{21}\cdot x_1 - a_{23}\cdot x_3\right)$$

$$x_3 = \frac{1}{a_{33}}\left(b_3 - a_{31}\cdot x_1 - a_{32}\cdot x_2\right)$$

Επομένως, για να εφαρμόσουμε επαναληπτική διαδικασία, αρκεί να πάρουμε:

$$x_1^{k+1} = \frac{1}{a_{11}}\left(b_1 - a_{12}\cdot x_2^k - a_{13}\cdot x_3^k\right)$$

$$x_2^{k+1} = \frac{1}{a_{22}}\left(b_2 - a_{21}\cdot x_1^k - a_{23}\cdot x_3^k\right)$$

$$x_3^{k+1} = \frac{1}{a_{33}}\left(b_3 - a_{31}\cdot x_1^k - a_{32}\cdot x_2^k\right)$$

Εύκολα καταλήγουμε στην επαναληπτική σχέση,

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{j-1} a_{ij}\cdot x_j^k - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\cdot x_j^k\right) \tag{12}$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζω τις αρχικές τιμές.

Βήμα 2. Εφαρμόζω την επαναληπτική σχέση του συστήματος (*Σχέση 9*)

Βήμα 3. Εφαρμόζω το κριτήριο σύγκλισης,

$$\mid x_i^{k+1} - x_i^k \mid \leq \varepsilon$$

Παράδειγμα 14

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει την λύση του συστήματος με την μέθοδο Jacobi.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 5 & -2 & 3 & -1 \\ -3 & 9 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & -7 & 3 \end{array}\right]$$

Αρχικά υπολογίζουμε την επαναληπτική σχέση απομονώνοντας το x_1, x_2 και x_3.

$$x_1^{\kappa+1} = \frac{-1}{5} + \frac{2}{5}x_2^\kappa - \frac{3}{5}x_3^\kappa$$

$$x_2^{\kappa+1} = \frac{2}{9} + \frac{3}{9}x_1^\kappa - \frac{1}{9}x_3^\kappa$$

$$x_3^{\kappa+1} = \frac{-3}{7} + \frac{2}{7}x_1^\kappa - \frac{1}{7}x_2^\kappa$$

Εκτελούμε τις επαναληπτικές αυτές σχέσεις!!

Λύση

5.2.2 Μέθοδος Gauss-Seidel

Η επαναληπτική μέθοδος Gauss-Seidel λειτουργεί με βάση την μέθοδο Jacobi, όμως με βελτιωμένο ρυθμό σύγκλισης. Επομένως, η *Σχέση 9* παίρνει την πιο κάτω μορφή

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}}\left(b_i - \sum_{j=1}^{j-1} a_{ij}\cdot x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij}\cdot x_j^{k}\right) \tag{13}$$

με λίγα λόγια, όποιο x_i υπολογίζουμε το χρησιμοποιούμε στην επόμενη προσέγγιση x_{i+1}!

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζω τις αρχικές τιμές.

Βήμα 2. Εφαρμόζω την επαναληπτική σχέση του συστήματος (*Σχέση 10*)

Βήμα 3. Εφαρμόζω το κριτήριο σύγκλισης,

$$\mid x_i^{k+1} - x_i^{k} \mid \leq \varepsilon$$

Παράδειγμα 15

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει την λύση του συστήματος με την μέθοδο Gauss-Seidel.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 5 & -2 & 3 & -1 \\ -3 & 9 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & -7 & 3 \end{array}\right]$$

Αρχικά υπολογίζουμε την επαναληπτική σχέση απομονώνοντας το x_1, x_2 και x_3.

$$x_1^{\kappa+1} = \tfrac{-1}{5} + \tfrac{2}{5}x_2^{\kappa} - \tfrac{3}{5}x_3^{\kappa}$$

$$x_2^{\kappa+1} = \tfrac{2}{9} + \tfrac{3}{9}x_1^{\kappa+1} - \tfrac{1}{9}x_3^{\kappa}$$

$$x_3^{\kappa+1} = \tfrac{-3}{7} + \tfrac{2}{7}x_1^{\kappa+1} - \tfrac{1}{7}x_2^{\kappa+1}$$

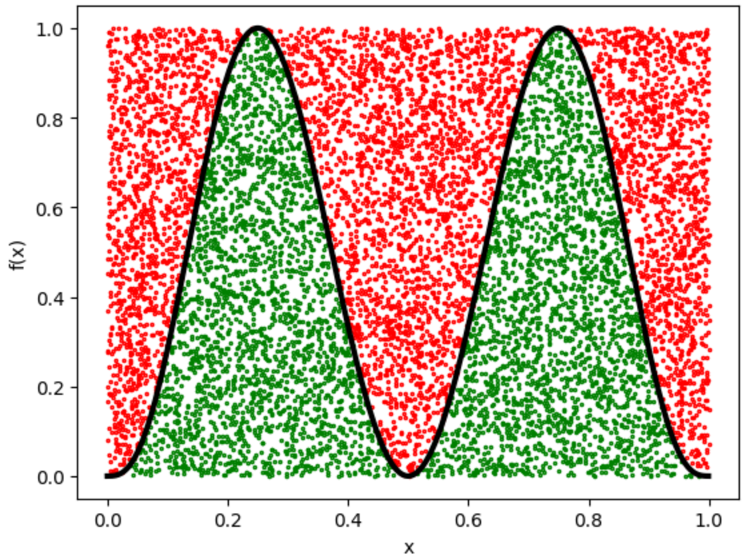
Εκτελούμε τις επαναληπτικές αυτές σχέσεις!!

Λύση

6 Monte Carlo Integrals

- Hit or Miss
- Crude Method (1-dim - n-dim)

6.1 Hit or Miss



Εικόνα

Η πιθανόντηα ένα τυχαίο σημείο να είναι εντός του επιθυμητού χώρου είναι,

$$P_{hit} = \frac{\#hit}{N} \tag{14}$$

όπου N: ο αριθμός των επαναλήψεων.

Θα πρέπει να απαντήσουμε σε δύο βασικά ερωτήματα. Ποιό είναι το κριτήριο hit; Ποιό είναι το πεδίο ορισμού των τυχαίων αριθμών;

Το κριτήριο επιτυχίας (hit) αναμένουμε να είναι για $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$

$$w_i \leq f(x_i, y_i) \quad \mu\varepsilon \quad R = [x_{min}, x_{max}] \times [y_{min}, y_{max}]$$

ή οποιοδήποτε κριτήριο μου εξασφαλίζει την περιοχή που θέλω!
όπου

$$x \sim Unif \;\; (x_{min}, x_{max})$$
$$y \sim Unif \;\; (y_{min}, y_{max})$$
$$w \sim Unif \;\; (f_{min}, f_{max})$$

Επομένως για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος,

$$\iint_R f(x,y) \cdot dS$$

υπολογίζουμε την σχέση

$$I = V_{space} \cdot P_{hit}$$

όπου V_{space}:

$$V_{space} = (x_{max} - x_{min}) \cdot (y_{max} - y_{min}) \cdot (f_{max} - f_{min})$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Εύρεση χώρου V_{space}

Βήμα 2. Παράγουμε N - τυχαίους αριθμούς:

$$x \sim Unif\ \ (x_{min}, x_{max})$$
$$y \sim Unif\ \ (y_{min}, y_{max})$$
$$w \sim Unif\ \ (f_{min}, f_{max})$$

Βήμα 3. Για $w_i \leq f(x_i, y_i)$

hit=hit +1

Βήμα 4. Υπολογίζουμε τα ακόλουθα,

$$P_{hit} = hit/N$$
$$I = P_{hit} \cdot V$$
$$\delta I = \frac{V_{space}}{\sqrt{N}} \cdot \sqrt{P_{hit} - P_{hit}^2}$$

Παράδειγμα 16

Υπολογίστε το πιο κάτω ολοκλήρωμα με την μέθοδο Hit or Miss.

$$\int_1^4 \frac{(sin(\sqrt{x}+1) \cdot e^{\sqrt{x}}}{\sqrt{x}}$$

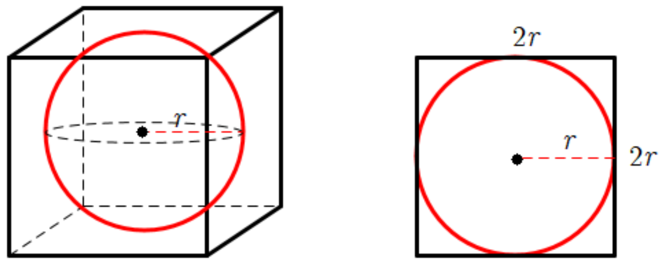
Λύση:

$$V_{space} = f_{max} \cdot (b-a) = f(1) \cdot (4-1)$$
$$x \sim Unif\ \ (1,4)$$
$$y \sim Unif\ \ (0, f_{max})$$
$$y_i \leq f(x_i) \quad \to hit!$$

Λύση

Παράδειγμα 17

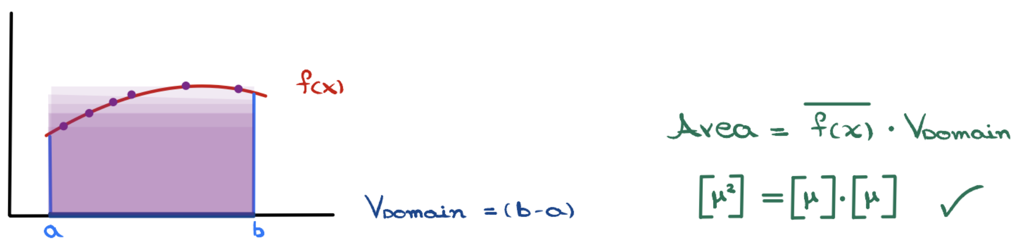
Υπολογίστε τον όγκο του κύβου αν σε αυτό υπάρχει σφαιρική οπή ακτίνας r=5, με την μέθοδο Hit or Miss.

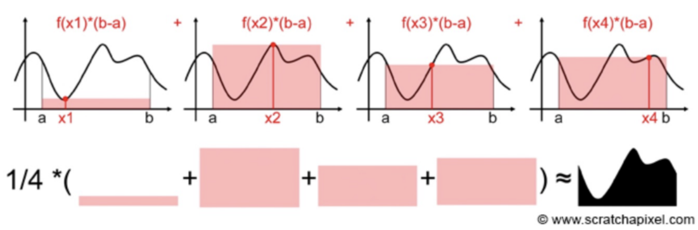


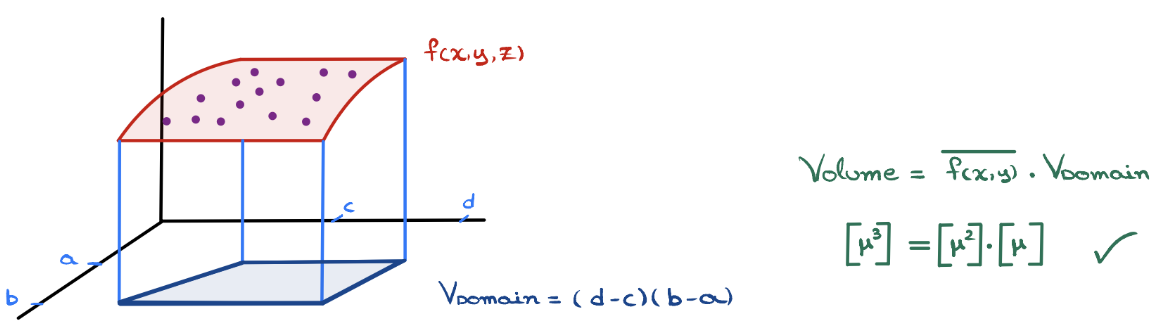
Λύση

Προσοχή: Το βασικό πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου, είναι ότι δέν χριάζεται να γνωρίζουμε την συνάρτηση !!

6.2 Crude method







6.2.1 Crude 1-dim

Σε αντίθεση με την μέθοδο hit or miss στην μέθοδος Crude, χρειάζεται να υπολογίσουμε μόνο την μέση τιμή της συνάρτησης (μέσο ύψος) στο domain που μας ενδιαφέρει και να το πολλαπλασιάσουμε επί το μήκος του domain!

$$I = \overline{f(x)} \cdot V_{Domain}$$

όπου,

$$V_{Domain} = (x_{max} - x_{min})$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Εύρεση χώρου V_{Domain}

Βήμα 2. Παράγουμε N - τυχαίους αριθμούς:

$$x \sim Unif \ \ (x_{min}, x_{max})$$

Βήμα 3. Υπολογίζουμε τα ακόλουθα,

$$I = \overline{f(x_i)} \cdot V_{Domain}$$

$$\delta I = \frac{V_{Domain}}{\sqrt{N}} \cdot \sigma_f$$

Παράδειγμα 18

Υπολογίστε το πιο κάτω ολοκλήρωμα με την μέθοδο Crude

$$\int_1^4 \frac{(sin(\sqrt{x}+1) \cdot e^{\sqrt{x}}}{\sqrt{x}}$$

Λύση:

$$V_{domain} = (b-a) = (4-1)$$
$$x \sim Unif \ \ (1, 4)$$

Λύση

6.2.2 Crude n-dim

Ομοίος μπορούμε να γενικεύσουμε την μέθοδο αυτή σε n- διάσταση!
Για $f(x,y) : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$,

$$I = \overline{f(x,y)} \cdot V_{Domain}$$

όπου

$$V_{Domain} = (x_{max} - x_{min}) \cdot (y_{max} - y_{min})$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Εύρεση χώρου V_{Domain}

Βήμα 2. Παράγουμε N - τυχαίους αριθμούς:

$$x \sim Unif\ \ (x_{min}, x_{max})$$

$$y \sim Unif\ \ (y_{min}, y_{max})$$

Βήμα 3. Υπολογίζουμε τα ακόλουθα,

$$I = \overline{f(x_i, y_i)} \cdot V_{Domain}$$

$$\delta I = \frac{V_{Domain}}{\sqrt{N}} \cdot \sigma_f$$

Προσοχή: Ομοίως, μπορούμε επεκτείνουμε σε οποιαδήποτε διάσταση!!

Παράδειγμα 19

Υπολογίστε το πιο κάτω ολοκλήρωμα με την μέθοδο Crude

$$\int_0^1 \int_{-1}^4 \int_2^3 z^3 - 4x^2 y \cdot dxdydz$$

Λύση:

$$V_{domain} = (f-e)(d-c)(b-a) = (1-0)(4+1)(3-2)$$
$$x \sim Unif\ \ (2,3)$$
$$y \sim Unif\ \ (-1,4)$$
$$z \sim Unif\ \ (0,1)$$

Λύση