HÁSKÓLI ÍSLANDS
VERKFRÆÐI- OG NÁTTÚRUVÍSINDASVIÐ

RAUNVÍSINDADEILD

Töluleg greining (STÆ405G)

Útgáfa 0.1

Benedikt Steinar Magnússon

January 23, 2016

KAFLI 1

Háskóli Íslands, haust 2016

Kennari: Benedikt Steinar Magnússon, bsm@hi.is.

KAFLI 2

Efnisyfirlit

2.1 Inngangur

He was determined to discover the underlying logic behind the universe. Which was going to be hard, because there wasn't one.

- Terry Pratchett, Mort

2.1.1 Hvað er töluleg greining?

Tilraun að svari

- Fagið *töluleg greining* snýst um að búa til, greina og forrita aðferðir til þess að nálga á lausnum á stærðfræðilegum verkefnum.
- Aðferðirnar eru settar fram með reikniritum sem síðan eru forrituð og það þarf góðan skilning á eiginleikum lausnanna sem verið er að nálga til þess að geta greint hvernig forritin munu virka.
- Greining á reikniritum er aðallega fólgin í skekkjumati og mati á þeim aðgerðafjölda sem þarf til þess að ná að nálga lausn með fyrirfram gefinni nákvæmni, þ.e. hagkvæmni og nákvæmni reikniritsins.
- Líkanagerð í raunvísindum og verkfræði felur yfirleitt í sér eftirfarandi skref:

  1. *Greina* kerfið sem um ræðir
  2. *Smíða líkan* sem útskýrir hvernig kerfið hegðar sér, þó yfirleitt með töluverðum einföldunum.
  3. *Herma* kerfið í tölvu eins vel og hægt er. Hér þarf að ná ásættanlegri námkvæmni á þeim tíma sem útreikningar mega taka.
  4. *Túlka* niðurstöðurnar og bera saman við upphaflega kerfið.

  Töluleg greining kemur mikið við sögu í lið 3. og einnig í lið 4.

2.1.2 Dæmi: Eldflaug

Gerum ráð fyrir að við höfum eftirfarandi eldflaug undir höndum:

- Eldsneytið dugir í 18 sek., þ.e. $t \in [0, 18]$.
- Loftmótstaðan er $d = 0.1v^2$, þar sem $v(t)$ er hraðinn á tíma t.
- Krafturinn sem knýr flaugina er $T = 5000$ N.
- Massi eldsneytisins er $m = 180 - 10t$ kg.
- Massi flaugarinnar er $M = 120 + m = 300 - 10t$ kg.

Spurningin er: Í hvaða hæð er eldflaugin þegar eldsneytið klárast?

Úr öðru lögmáli Newtons fæst að $F = (Mv)'$. Kraftarnir sem verka á eldflaugina er T upp á við og loftmótstaðan og þyngdarkrafturinn niður á við. Þannig fæst

$$(Mv)' = F = T - Mg - d$$

það er

$$M'v + Mv' = T - Mg - d.$$

Þetta jafngildir því að

$$v' = \frac{T - Mg - d - M'v}{M} = \frac{5000 - (300 - 10t)g - 0,1v^2 + 10v}{300 - 10t},$$

og upphafsskilyrðin eru $v(0) = 0$.

Þar sem $h' = v$, þá er hæðin á tíma t gefin með $h(t) = \int_0^t v(s)\,ds$. Þegar eldsneytið klárast þá er hæðin $h(18) = \int_0^{18} v(s)\,ds$.

Verkefnið er því að finna v, og reikna svo heildið.

Diffurjafnan hér að ofan er ólínuleg og ekki aðgreinanleg þannig að við getum ekki vænst þess finna lausn með þeim aðferðum sem við höfum þegar lært. Eins er ekki víst að við getum auðveldlega fundið stofnfall h fyrir v til þess að reikna heildið, jafnvel þótt við hefðum v.

Hins vegar getum við leyst diffurjöfnuna tölulega með aðferðunum úr *kafla 6*, og heildið reiknum við svo tölulega með aðferðunum úr *kafla 5*.

2.1.3 Samleitni runa

Nokkur atriði um samleitni runa

Mörg reiknirit til nálgunar á einhverri rauntölu eru hönnuð þannig að reiknuð er runa $x_0, x_1, x_2, \ldots$ sem á að nálgast lausnina okkar.

Skilgreining: Samleitni

Rauntalnaruna (x_n) er sögð vera *samleitin* (e. convergent) að *markgildinu* r ef um sérhvert $\varepsilon > 0$ gildir að til er $N > 0$ þannig að

$$|x_n - r| < \varepsilon, \qquad \text{ef} \quad n \geq N.$$

Þetta er táknað annað hvort með

$$\lim_{n\to\infty} x_n = r \qquad \text{eða} \qquad x_n \to r \text{ ef } n \to \infty.$$

Ef runan (x_n) er samleitin að markgildinu r þá segjum við einnig að hún *stefni á* r.

Hugsum okkur nú að (x_n) sé gefin runa sem stefnir á r og táknum skekkjuna með $e_n = r - x_n$.

Runan er sögð vera *línulega samleitin* (e. linear convergence) ef til er $\lambda \in]0,1[$ þannig að

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|} = \lambda,$$

ofurlínulega samleitin (e. superlinear convergence), ef

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|} = 0,$$

ferningssamleitin (e. quadratic convergence) ef til er $\lambda > 0$ þannig að

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^2} = \lambda,$$

og *samleitin af stigi* α (e. convergence of order α), þar sem $\alpha > 1$, ef til er $\lambda > 0$ þannig að

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|e_{n+1}|}{|e_n|^\alpha} = \lambda.$$

Athugasemd: Runa er ofurlínulega samleitin ef hún er samleitin af stigi $\alpha > 1$.

Ferningssamleitin runa er samleitin af stigi 2 þannig að hún er einnig ofurlínulega samleitin.

Skilgreining

Oft eru notuð veikari hugtök til þess að lýsa samleitni runa (t.d. ef við getum ekki fundið λ og α nákvæmlega).

Þannig segjum við að runan (x_n) sé *að minnsta kosti línulega samleitin* ef til er $\lambda \in]0,1[$ og $N > 0$ þannig að

$$|e_{n+1}| \leq \lambda |e_n|, \qquad n \geq N,$$

ef til er $\lambda > 0$ og $N > 0$ þannig að

$$|e_{n+1}| \leq \lambda |e_n|^2, \qquad n \geq N,$$

og *að minnsta kosti samleitin af stigi* α, þar sem $\alpha > 1$, ef til eru $\lambda > 0$ og $N > 0$ þannig að

$$|e_{n+1}| \leq \lambda |e_n|^\alpha, \qquad n \geq N.$$

2.1.4 Setning Taylors

Sometimes it's better to light a flamethrower than curse the darkness. - Terry Pratchett, Men at Arms: The Play

Rithättur fyrir diffranleg föll

Látum nú $f : I \to \mathbb{C}$ vera fall á bili I sem tekur gildi í tvinntölunum. Ef f er deildanlegt í sérhverjum punkti í I, þá táknum við afleiðuna með f'. Ef f' er deildanlegt í sérhverjum punkti í I, þá táknum við *aðra afleiðu* f með f'', og svo framvegis.

Við skilgreinum með þrepun $f^{(k)}$ fyrir $k = 0, 1, 2, \ldots$ þannig að $f^{(0)} = f$ og ef $f^{(k-1)}$ er deildanlegt í sérhverjum punkti í I, þá er $f^{(k)} = (f^{(k-1)})'$.

Við látum $C^k(I)$ tákna línulega rúmið sem samanstendur af öllum föllum $f : I \to \mathbb{C}$ þannig að $f', \ldots, f^{(k)}$ eru til í sérhverjum punkti í I og $f^{(k)}$ er samfellt fall á I.

Nálgun með Taylor-margliðu

Ef $a \in I$, m er jákvæð heiltala og $f \in C^m(I)$, þá nefnist margliðan

$$p(x) = f(a) + f'(a)(x-a) + \ldots + \frac{f^{(m)}(a)}{m!}(x-a)^m$$

Taylor-margliða fallsins f í punktinum a af stigi m, og er stundum táknuð með $T_m f(x; a)$.

Athugið að stig margliðunnar p er minna eða jafnt og m.

Setning Taylors

Látum $I \subseteq \mathbb{R}$ vera bil, $f : I \to \mathbb{C}$ vera fall, $m \geq 0$ vera heiltölu og gerum ráð fyrir að $f \in C^m(I)$ og að $f^{(m+1)}(x)$ sé til í sérhverjum innri punkti bilsins I. Þá er til punktur ξ á milli a og x þannig að

$$f(x) - T_m f(x; a) = \frac{f^{(m+1)}(\xi)}{(m+1)!}(x-a)^{m+1}.$$

Hægri hliðin er oft táknuð $R_m(x)$.

Athugasemd: Þetta þýðir að skekkjan í því að nálga fallið $f(x)$ með Taylor-margliðu af stigi m hagar sér eins og $(x-a)^{m+1}$.

Viðbót

Ef $f^{(m+1)}$ er samfellt á lokaða bilinu með endapunkta a og x, þá er

$$\begin{aligned} R_m(x) &= f(x) - T_m f(x; a) \\ &= \int_a^x \frac{(x-t)^m}{m!} f^{(m+1)}(t) dt \\ &= (x-a)^{m+1} \int_0^1 \frac{(1-s)^m}{m!} f^{(m+1)}(a + s(x-a)) ds. \end{aligned}$$

Sýnidæmi: Nálgun á fallgildum $x - \sin x$

Vitum að $x \approx \sin x$ ef x er lítið. Tökum $x = 0.1$ og hugsum okkur að við séum að reikna á vél með 8 stafa nákvæmni. Hún gefur

$$\sin 0.1 = 0.099833417$$

Af því leiðir

$$0.1 - \sin 0.1 = 1.66583 \cdot 10^{-4}$$

Við höfum tapað tveimur markverðum stöfum í nákvæmni.

Ef við notum Taylor-nálgunina fyrir $\sin(x)$,

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} \cdots$$

og tökum fyrstu þrjá liðina, þ.e. skoðum 6. stigs Taylor-margliðu fallsins.

$x - \sin(x)$ er þá u.þ.b.

$$x - \left(x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} \right) = \frac{x^3}{3!} - \frac{x^5}{5!}.$$

Fallgildið er þá

$$\frac{0.1^3}{3!} - \frac{0.1^5}{5!} = 1.6658334 \cdot 10^{-4}.$$

Skekkjan er gefin með

$$|R_6(0.1)| = \left| \frac{\sin^{(7)}(\xi)}{7!} 0.1^7 \right| = \left| \frac{-\cos(\xi)}{7!} 0.1^7 \right| \leq \frac{1}{7!} 0.1^7 < 0.2 \cdot 10^{-10}.$$

Sem þýðir að allir 8 stafir reiknivélarinnar eru markverðir, þ.e. allir stafir $1.6658334 \cdot 10^{-4}$ eru réttir.

$\sin^{(7)}$ hér að ofan táknar 7. afleiðu $\sin$, sem er $-\cos$.

Ef við tökum $x = 0.01$ er þetta enn greinilegra. Reiknivélin gefur

$$\sin(0.01) = 0.0099998333$$

Þannig að

$$0.01 - \sin 0.01 = 0.1667 \cdot 10^{-7}$$

og við erum bara með 4 markverða stafi.

Hér dugir að taka aðeins þriðja stigs liðinn í Taylor-formúlunni

$$0.01 - \sin(0.01) \approx \frac{0.01^3}{3!} = 0.16666667 \cdot 10^{-7},$$

því skekkjan er

$$R_4(0.01) \leq \frac{0.01^5}{5!} < 10^{-12}$$

2.1.5 Skekkjur

Við allar úrlausnir á verkefnum í tölulegri greininingu þarf að fást við skekkjur. Þær eru af ýmsum toga:

- Gögn eru oft niðurstöður mælinga og þá fylgja þeim *mæliskekkjur*. Eins getum við þurft að notast við nálganir á föstum sem koma fyrir (t.d. π, Avogadrosar talan, ...).
- Við nálganir á lausnum á stærðfræðilegum verkefnum verða til *aðferðarskekkjur*. Þær verða til þegar reikniritin eru hönnuð og greining á reikniritum snýst fyrst og fremst um mat á aðferðarskekkjum.
- *Reikningsskekkjur* verða til í tölvum á öllum stigum, jafnvel þegar tölur eru lesnar inn í tugakerfi og þeim snúið yfir í tvíundarkerfi. Þær verða líka til vegna þess að tölvur geta einungis unnið með endanlegt mengi af tölum og allar útkomur þarf að nálga innan þess mengis. Þessar skekkjur nefnast oft *afrúningsskekkjur*.
- *Mannlegar villur* eru óumflýjanlegar. Það sem við getum gert er temja okkur vinnubrögð sem lágmarka líkur á þeim og auðvelda okkur að finna villur sem við gerum.

  Real stupidity beats artificial intelligence every time. – Terry Pratchett

Skekkja í nálgun á rauntölu r

Við getum stillt upp jöfnunum svona

$$r \text{ (rétt gildi) } = x \text{ (nálgunargildi)} + e \text{ (skekkja)}$$

þar sem talan x er nálgun á tölunni r, og þá nefnist

$$e = r - x$$

skekkjan (e. error) í nálgun á r með x eða bara *skekkja*.

Algildi skekkju (e. absolute error) er tölugildið $|e| = |r - x|$

Ef vitað er að $r \neq 0$, þá nefnist

$$\frac{|e|}{|r|} = \frac{|r - x|}{|r|}$$

hlutfallsleg skekkja (e. relative error) í nálgun á r með x.

> **Aðvörun:** Auðvitað er talan r sem við leitum að óþekkt (annars þyrftum við ekki að framkvæma alla þessa reikninga), sem þýðir að við getum hvergi notað hana í reikningum.

Fyrirframmat á skekkju

Metið er áður en reikningar hefjast hversu umfangsmikla reikninga þarf að framkvæma til þess að nálgunin náist innan fyrirfram gefinna skekkjumarka.

Ef lausnin er fundin með ítrekunaraðferð er yfirleitt metið hversu margar ítrekarnir þarf til þess að nálgun verði innan skekkjumarka.

Eftirámat á skekkju

Um leið og reikningar eru framkvæmdir er lagt mat á skekkju og reikningum er hætt þegar matið segir að nálgun sé innan skekkjumarka. Það gerist yfirleitt þegar gildið sem við reiknum út breytist orðið lítið í hverju skrefi.

Hér þarf að skipta í tvö tilvik, fyrst skoðum við tilvikið þegar runan er ofurlínulega samleitin og seinna tilvikið er þegar við vitum aðeins að runan er línulega samleitin, en þá er matið aðeins flóknara.

Ofurlínuleg samleitni – Eftirámat á skekkju

Hugsum okkur að við séum að nálga töluna r með gildum rununnar x_n, að við höfum reiknað út $x_0, \dots, x_n$ og viljum fá mat á skekkjunni $e_n = r - x_n$ í n-ta skrefi.

Við reiknum næst út x_{n+1} og skrifum $e_{n+1} = \lambda_n e_n$. Þá er

$$x_{n+1} - x_n = (r - x_n) - (r - x_{n+1}) = e_n - e_{n+1} = (1 - \lambda_n) e_n$$

og við fáum

$$e_n = \frac{x_{n+1} - x_n}{1 - \lambda_n}.$$

Ef við vitum að runan er *ofurlínulega samleitin*, þá stefnir λ_n á 0 og þar með er

$$e_n \approx x_{n+1} - x_n.$$

Við hættum því útreikningi þegar $|x_{n+1} - x_n| < \varepsilon$ þar sem ε er fyrirfram gefin tala, sem lýsir þeirri nákvæmni sem við viljum ná.

Línuleg samleitni – Eftirámat á skekkju

Skoðum nú tilvikið ef einu upplýsingarnar sem við höfum er að runan x_n sé *að minnsta kosti línulega samleitin*, þ.e. $c \in [0, 1)$ og $N \in \mathbb{N}$ þannig að

$$|e_{n+1}| \leq c|e_n|, \qquad \text{fyrir } n \geq N.$$

Þá stefnir $\lambda_n = e_{n+1}/e_n$ á fasta $\lambda \leq c$ og við höfum

$$\lambda_n = \frac{e_{n+1}}{e_n} = \frac{1 - \lambda_n}{1 - \lambda_{n+1}} \cdot \frac{x_{n+2} - x_{n+1}}{x_{n+1} - x_n} \approx \frac{x_{n+2} - x_{n+1}}{x_{n+1} - x_n}$$

Nú þurfum við að átta okkur á því hvernig þetta er nýtt í útreikningum.

Hugsum okkur að við höfum reiknað út $x_0, \dots, x_n$ og viljum fá mat á e_n. Við reiknum þá út x_{n+1} og x_{n+2} og síðan hlutfallið $\kappa_n = (x_{n+2} - x_{n+1})/(x_{n+1} - x_n)$ sem við notum sem mat á λ_n. Eftirámatið á skekkjunni í ítrekunarskrefi númer n verður síðan

$$e_n \approx \frac{x_{n+1} - x_n}{1 - \kappa_n}.$$

Ef stærðin í hægri hliðinni er komin niður fyrir fyrirfram gefin skekkjumörk ε, þá stöðvum við útreikningana.