1. Źródła błędów w obliczeniach numerycznych

Na wyniki obliczeń numerycznych wpływa wiele rodzajów błędów ograniczających ich dokładność:

* Błędy danych wejśćiowych
* Zaokrąglenia w czasie obliczeń
* Błędy zakresu
* Błędy obcięcia
* Zniedbywalne składniki
* Utrata cyfr znaczących
* Uproszczenia modelu matematycznego
* Błędy człowieka i maszynowe

Z błędami danych wejściowych mamy do czynienia wówczas, gdy wartości wejściowe obarczone są niepewnością (jak to zwykle bywa w pomiarach fizycznych). Do tej klasy zaliczamy też niedokładności powstające przy przekształcaniu danych wejściowych do reprezentacji zmiennopozycyjnej. Wiemy już, że liczb maszynowych jest skończenie wiele, więc nawet jeśli dane wejściowe znane są dokładnie, jest wysoce nieprawdopodobne, że wszystkie one będą reprezentowane dokładnie w pamięci komputera. Podobnymi z natury są również zaokrąglenia w czasie obliczeń. Jeśli wynik nie będzie liczbą maszynową, zostanie zaokrąglony do najbliższej z nich. Z błędami zakresu mieliśmy już do czynienia wcześniej. Wynikają one z faktu, że niektóre działania, nawet jeśli ich argumenty leżą w dozwolonym zakresie liczb, mogą poza ten zakres wyprowadzić. Błędy obcięcia powstają wtedy, gdy proces obliczania granicy zostaje przerwany przed osiągnięciem wartości granicznej. Typowym przykładem jest przybliżanie sumy szeregu nieskończonego sumą skończonej ilości składników. Zaniedbywalne składniki i utrata cyfr znaczących to w zasadzie błędy zaokrągleń. Jednak mają one tak duże znaczenie, że zostały ujęte w oddzielnych kategoriach i zostaną opisane w dalszej części tego rozdziału. Uproszczenia modelu matematycznego to chleb powszedni każdego fizyka. Mamy z nimi do czynienia wszędzie tam, gdzie do opisu rzeczywistej sytuacji używa się wyidealizowanego modelu matematycznego. Do kategorii błędów człowieka i maszynowych należą wszelkie pomyłki oraz niedokładności wynikające z używania wadliwego sprzętu bądź oprogramowania.

1. Co to są cyfry poprawne i znaczące ?

Mówiąc o ułamku dziesiętnym, możemy mówić o cyfrach ułamkowych oraz o cyfrach istotnych. Cyfry ułamkowe to wszystkie cyfry po kropce dziesiętnej. Natomiast przy cyfrach istotnych nie uwzględnia się zer na początku ułamka. Przykład Liczba 0,00245 ma pięć cyfr ułamkowych, ale tylko 3 cyfry istotne. 12,12 ma cztery cyfry istotne i dwie ułamkowe. Jeżeli moduł błędu wartości x nie przewyższa 1/2 ∗ 10^−t , to mówimy, że x ma t poprawnych cyfr ułamkowych. Cyfry istotne występujące w x do pozycji t–tej po kropce nazywamy cyframi znaczącymi. Przykład Liczba 0, 001234 ± 0, 0000004 ma pięć cyfr poprawnych (ponieważ 0, 000004 < 1/2 ∗ 10^−5 ) i trzy znaczące. Liczba cyfr poprawnych daje pojęcie o wielkości błędu bezwzględnego, a liczba cyfr znaczących - o wielkości błędu względnego.

1. Przenoszenie się błędów w poszczególnych działaniach arytmetycznych.

O przenoszeniu się błędów mówimy wtedy, gdy jakaś wielkość wyliczana jest z innych, obarczonych błędami.

**Dodawanie i odejmowanie**

***Twierdzenie*** *Oszacowanie błędu bezwzględnego wyniku dodawania lub odejmowania jest sumą oszacowań błędów bezwzględnych składników.*

**Mnożenie i dzielenie**

***Twierdzenie*** *W mnożeniu i dzieleniu oszacowania błędu względnego argumenetów (o ile tylko błędy te są << 1) dodają się.*

**Ogólny wzór na przenoszenie się błędów**

1. Na czym polega znoszenie się składników?

Utrata cyfr znaczących (ang. loss of significance) to dość częsty błąd przy odejmowaniu dużych, zbliżonych do siebie wartością liczb.

1. Jakie algorytmy nazywamy równoważnymi matematycznie, a jakie - równoważnymi numerycznie?

**Definicja** Algorytmy nazywamy równoważnymi matematycznie, jeśli dają te same wyniki dla jednakowych danych wejściowych, o ile tylko obliczenia wykonuje się bez zaokrągleń.

**Definicja** Algorytmy nazywamy równoważnymi numerycznie, gdy wyniki dla jednakowych danych wejściowych różnią się tylko o tyle, o ile mogą zmienić się dokładne dane wyjściowe zadania, gdy dane wejściowe zaburzy się o niewiele u, gdzie u jest względnym błędem zaokrąglenia lub ucięcia.

1. Co znaczy, że algorytm jest klasy np. O(n^2)?

Notacja O nie podaje dokładnego czasu wykonania algorytmu. Pozwala jednak odpowiedzieć na pytanie, jak ten czas będzie rósł z rozmiarem danych wejściowych. wybieramy wiersz programu znajdujący się w najgłębiej położonej instrukcji iteracyjnej, następnie zliczamy ilość jego wywołań i na tej podstawie wnioskujemy o klasie algorytmu.

1. Na czym polega interpolacja?

Metoda numeryczna polegająca na wyznaczaniu w danym przedziale tzw. funkcji interpolacyjnej, która przyjmuje w nim z góry zadane wartości, w ustalonych punktach nazywanych węzłami. Stosowana jest ona często w naukach doświadczalnych, gdzie dysponuje się zazwyczaj skończoną liczbą danych do określenia zależności między wielkościami oraz w celu uproszczenia skomplikowanych funkcji, np. podczas całkowania numerycznego. Interpolacja jest szczególnym przypadkiem metod numerycznych typu aproksymacja.

1. Na czym polega zjawisko Rungego?

Pogorszenie jakości interpolacji wielomianowej, mimo zwiększenia liczby jej węzłów. Początkowo ze wzrostem liczby węzłów n przybliżenie poprawia się, jednak po dalszym wzroście n, zaczyna się pogarszać, co jest szczególnie widoczne na końcach przedziałów.

Takie zachowanie się wielomianu interpolującego jest zjawiskiem typowym dla interpolacji za pomocą wielomianów wysokich stopni przy stałych odległościach węzłów. Występuje ono również, jeśli interpolowana funkcja jest nieciągła albo odbiega znacząco od funkcji gładkiej.

1. Kiedy warto stosować interpolację wymierną lub trygonometryczną?

Interpolacja trygonometryczna służy przede wszystkim przybliżaniu funkcji okresowych. Idea stojąca za tą interpolacją jest następująca: wielomiany z powodu braku okresowości powodują duże błędy podczas przybliżeń funkcji okresowych, z tego względu używa się zamiast nich funkcji trygonometrycznych mających właśnie charakter okresowy.

Interpolacja wymierna polega na przybliżaniu funkcji za pomocą funkcji wymiernej. Rozwiązanie zadania interpolacji wymiernej nie zawsze jest możliwe do wykonania.

1. Dlaczego należy z ostrożnością ekstrapolować dane za pomocą wielomianów interpolacyjnych?

Ponieważ może wystąpić efekt Rungego?

1. Kiedy warto stosować interpolację przedziałami liniową?

Do przybliżania funkcji nieregularnych na większych przedziałach. Wybiera się interpolację wielomianami niskiego stopnia (najczęściej trzeciego), jednak dzieli się przedział interpolacji na mniejsze i na każdym z nich przeprowadza niezależnie interpolację. Aby poprawić przybliżenie nakłada się dodatkowe warunki gładkości na brzegach podziałów, zwykle zgodność pochodnych stopnia o jeden mniejszego niż stopień użytych do interpolacji wielomianów, co wraz z ustalonymi warunkami brzegowymi daje jednoznaczność rozwiązania zadania.

1. Zalety i wady interpolacji funkcjami sklejanymi trzeciego stopnia w porównaniu z interpolacją wielomianową i przedziałami liniową.
2. Czy zagadnienie interpolacji funkcjami sklejanymi jest jednoznaczne?

Naturalna funkcja sklejana interpolująca \displaystyle f jest wyznaczona jednoznacznie wtedy i tylko wtedy, gdy układ ten ma jednoznaczne rozwiązanie. To zaś zachodzi, gdy zero jest jedynym rozwiązaniem układu jednorodnego. Rzeczywiście, układ jednorodny odpowiada zerowym warunkom interpolacyjnym, przy których, jak pokazaliśmy wcześniej, zerowa funkcja sklejana (której odpowiada \displaystyle a_{i,j}=0, \displaystyle \forall i,j) jest jedynym rozwiązaniem zadania interpolacyjnego.

1. Jaka jest różnica między interpolacją a aproksymacją? Kiedy warto stosować tą ostatnią?

Interpolacja - przybliżanie funkcji za pomocą funkcji z pewnej klasy, np. wielomianami, funkcjami trygonometrycznymi, funkcjami sklejanymi itp. Znane są dokładne wartości funkcji w punktach węzłowych.

Aproksymacja - funkcja aproksymująca nie musi wcale przyjmować identycznych wartości jak funkcja aproksymowana. W każdym razie nie ma tu punktów węzłowych. Kryteria aproksymacyjne są różne, np. kryterium średniokwadratowe jak w metodzie najmniejszych kwadratów.

1. Co to jest kwadratura?

Synonim całkowania numerycznego, w szczególności w odniesieniu do całek jednowymiarowych. Wyrażenie

Nazywamy kwadraturą. Argumenty x\_k nazywamy węzłami kwadratury.

1. Dlaczego, jeżeli przedział całkowania jest duży, w miejsce kwadratur Newtona–Cotesa powinniśmy stosować ich złożone wersje?

Błąd kwadratur Newtona-Cotesa jest proporcjonalny do pewnej potęgi długości przedziału całkowania. Jeżeli przedział całkowania jest duży, kwadratura może nie zapewnić żadnej dokładności. Wyjście:

- Podziel przedział całkowania [a,b] na pewną liczbę podprzedziałów.

- W każdym podprzedziale zastosuj kwadraturę niskiego rzędu i zsumuj wyniki.

1. Na czym polega (pojęciowo) metoda Romberga? Gdzie jeszcze spotkałeś się z podobną filozofią?

Jedna z metod całkowania numerycznego, opierająca się na metodzie ekstrapolacji Richardsona, pozwalająca przybliżać wartość całki nieznanej funkcji f. Funkcja ta jest zazwyczaj znana tylko na dyskretnym zbiorze argumentów (np. Jako wynik pomiarów stanu urządzenia (wartość funkcji) dla różnych stanów (argument funkcji)).

Metodę Romberga można opisać rekurencyjnie:

jest wzorem trapezów, po obliczeniu pierwszej kolumny tzw. Tablic Romberga, kolejne kolumny obliczane są rekurencyjnie, otrzymując coraz lepsze przybliżenie funkcji:

1. Na czym polega idea kwadratur Gaussa? Czym różnią się one od kwadratur Newtona–Cotesa?

Kwadratury Gaussa – metody całkowania numerycznego polegające na takim wyborze wag i węzłów interpolacji aby wyrażenie najlepiej przybliżało całkę gdzie jest dowolną funkcją określoną na odcinku , a jest tzw. Funkcją wagową spełniającą warunki

1. jest skończona
2. Jeżeli jest wielomianem takim, że to jeśli , mamy wtedy

Kwadratury Newtona-Cotesa – przyjmujemy, że warość funkcji f jest znana w równo oddalonych punktach dla i=0,...,n. Dla punktów oddalonych od siebie o inne odległości ma zastosowanie zastosowania kwadratura gaussowska.

1. Jak otrzymuje się odcięte punktów węzłowych kwadratur Gaussa?
2. Jaka jest różnica między próbkowaniem bezpośrednim a ważonym w całkowaniu metodą Monte Carlo?

Próbkowanie bezposrednie ´ (xi sa˛równomiernie rozłozone ˙ w całym przedziale [a, b])

1. Do jakich problemów warto jest stosować metodę Monte Carlo?

Metoda Monte Carlo (MC) jest stosowana do modelowania matematycznego procesów zbyt złożonych (obliczania całek, łańcuchów procesów statystycznych), aby można było przewidzieć ich wyniki za pomocą podejścia analitycznego. Istotną rolę w metodzie MC odgrywa losowanie (wybór przypadkowy) wielkości charakteryzujących proces, przy czym losowanie dokonywane jest zgodnie z rozkładem, który musi być znany.

1. Najbardziej naturalną metodą różniczkowania numerycznego wydaje się zastąpienie pierwszej pochodnej funkcji ilorazem różnicowym. Dlaczego zatem uciekamy się często do innych sposobów obliczania pochodnej?

Po pierwsze, nie da się na komputerze przedstawić dowolnie małej liczby. Po drugie, jeżeli h będzie

zbyt małe w porównaniu z x, to w argumencie x+h może dojść do zaniedbania składnika. Po trzecie, dla małych h wartości f(x+h) i f(x) mogą tak nieznacznie różnić się od siebie, że przy odejmowaniu dojdzie do utraty cyfr znaczących.

1. Jakie są zalety i wady wielopunktowych metod różniczkowania numerycznego?
2. Kiedy wzory trzypunktowe na pierwszą i drugą pochodną są “dobre”?
3. Jak radzić sobie z obliczeniem pochodnej w punktach brzegowych jakiegoś przedziału, zwłaszcza, jeśli stosujemy wzory wielopunktowe?
4. Na czym polega ekstrapolacja Richardsona?

Procedura polegająca na otrzymaniu wzoru o dokładności O(h^4) z dwóch przybliżeń klasy O(h^2)

1. Co to są metody dokładne i iteracyjne rozwiązywania układów równań liniowych?

Metody dokładne polegają na tym, że po skończonej liczbie działań arytmetycznych na współczynnikach układu równań otrzymujemy rozwiązanie tego układu.

Metody przybliżone (iteracyjne) polegają na sekwencyjnym postępowaniu, w wyniku którego otrzymujemy rozwiązanie układu równań, z tym że w każdym kroku uzyskujemy kolejno przybliżenie szukanego rozwiązania. Metody te są procesami nieskończonymi, przerywanymi w momencie, gdy zostaje osiągnięta zadana dokładność rozwiązania. Dla metod iteracyjnych istotna jest sprawa dotycząca zbieżności ciągu kolejnych przybliżeń.

1. Po co stosuje się częściowy wybór elementu podstawowego w wielu metodach rozwiązywania układów równań liniowych (np. Gaussa, Doolittle’a, Jordana)? I dlaczego nie stosuje się na ogół całkowitego wyboru tego elementu?

Częściowy wybór elementu podstawowego zalecany jest dla układów, których macierze nie mają zerowych elementów na głównej przekątnej, ponieważ w większości przypadków prowadzi do redukcji błędów zaokrągleń. Również aby uniknąć problemów związanych z dzieleniem przez zero Zdarzają sie jednak przypadki, w których dokładność po jego zastosowaniu może się pogorszyć.

Metody tej nie stosuje się często, ponieważ zamiana kolumn (i odpowiednia zamiana kolejności składowych w wektorze niewiadomych) wiąże się z dodatkowymi kosztami w obliczeniach.

1. Jaka jest podstawowa różnica między iteracyjnym poprawianiem rozwiązania układu równań liniowych a iteracyjnym rozwiązaniem tego układu?

Metoda poprawiania rozwiązań to szczególny przypadek metod iteracyjnych, startujących z pewnego przybliżenia początkowego, które potem jest stopniowo ulepszane aż do uzyskania dostatecznie dokładnego rozwiązania.

1. Na czym polega idea metod iteracyjnych (wzór rekurencyjny)? Kiedy metody te są zbieżne?
2. Do jakich typów układów równań liniowych stosuje się najczęściej metody iteracyjne? Dlaczego?

Metody iteracyjne stosuje się najczęściej do dużych układów rzadkich, tzn. takich, których macierze zawierają w większości zera.

1. Co to jest przedział izolacji pierwiastka równania f(x) = 0? Jak najłatwiej jest określić ten przedział?

Przedział, w którym jest on jedynym rozwiązaniem rozpatrywanego równania. Jeżeli

, to ciągła funkcja mumsi mieć w przedziale (a,b) przynajmniej jeden pierwiastek. Jeżeli dodatkowo przedział ten będzie mały, istnieje duże prawdopodobieństo, że będzie on przedziałem izolacji danego pierwiastka.

1. Wady i zalety metody bisekcji.

Zalety:

- najprostsza metoda lokalizacji pierwiastków

Wady:

- nierówności mogą być niespełnione przy skończonej dokładności dziesiętnej

- wolna

1. Geometryczna interpretacja metody siecznych i metody stycznych.

Metoda siecznych – polega na przyjęciu, że funkcja na dostatecznie małym odcinku w przybliżeniu zmienia się w sposób liniowy. Możemy wtedy na odcinku krzywą zastąpić sieczną. Za przybliżoną wartość pierwiastka przyjmujemy punkt przecięcia siecznej z osią OX

Metoda stycznych – założenia dla funkcji f:

1. W przedziale znajduje się dokładnie jeden pierwiastek
2. Funkcja ma różne znaki na krańcach przedziału tj.
3. Pierwsza i druga pochodna funkcji mają stały znak w tym przedziale

W pierwszym kroku metody wybierany jest punkt startowy (zazwyczaj to wartość a,b,0 lub 1), z którego następnie wyprowadzana jest styczna w . Odcięta punktu przecięcia stycznej z osią OX jest pierwszym przybliżeniem rozwiązania (ozn. ). Jeśli przybliżenie nie jest satysfakcjonujące, wówczas punkt jest wybierany jako nowy punkt startowy i wszystkie czynności są powtarzane. Proces jest kontynuowany, aż zostanie uzyskane wystarczająco dobre przybliżenie pierwiastka. Kolejne przybliżenia są dane rekurencyjnym wzorem:

1. Które z metod poznanych na wykładzie i kiedy możemy używać do szukania pierwiastków wielokrotnych funkcji f(x). Czy możliwe jest takie zmodyfikowanie zagadnienia, aby ponownie można było używać wszystkich metod?
2. Dlaczego w przypadku ogólnym raczej niewskazane jest używać wielomianu charakterystycznego do wyznaczania wartości własnych macierzy?
3. Dla jakich macierzy zadanie znalezienia wartości własnych jest zadaniem na pewno dobrze uwarunkowanym?
4. Na czym polega metoda potęgowa wyszukiwania wartości własnych?
5. Dlaczego w przypadku macierzy hermitowskich problem znalezienia wartości własnych znacznie się upraszcza?