

Εργασία Αριθμητικής Ανάλυσης

Μαρία Χριστοπούλου

A.M 200600237

10 Μαρτίου 2013

Περιεχόμενα

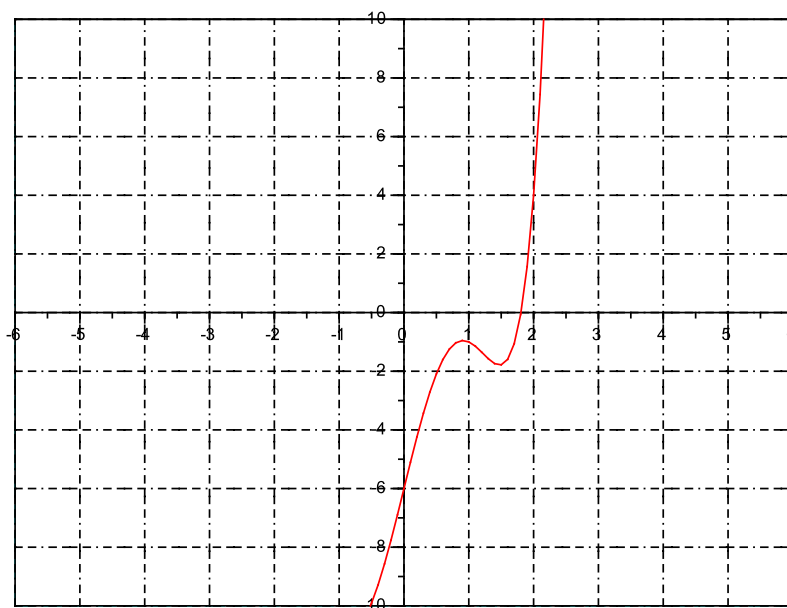
1	Εύρεση Ριζών Εξίσωσης	1
1.1	Μέθοδος Διχοτόμησης	1
1.2	Μέθοδος Newton	3
1.3	Μέθοδος Σταθερού Σημείου	4
1.4	Σύγκριση Μεθόδων	8
2	Πολυωνυμική Παρεμβολή	9
2.1	Πολυωνυμική Παρεμβολή με πολυώνυμο Taylor	9
2.2	Πολυωνυμική Παρεμβολή με πολυώνυμο Lagrange	12
3	Αριθμητική Παραγωγή	13
3.1	Αριθμητική Παραγωγή 3 σημείων	13
3.2	Αριθμητική Παραγωγή 5 σημείων	16
3.3	Αριθμητική Παραγωγή 7 σημείων	17
3.4	Σύγκριση Μεθόδων	18
4	Αριθμητική Ολοκλήρωση	18
4.1	Μέθοδος Τραπεζίου	19
4.2	Μέθοδος Simpson 1/3	19
4.3	Μέθοδος Simpson 3/8	20
4.4	Σύγκριση Μεθόδων	20
5	Αριθμητική επίλυση Διαφορικής Εξίσωσης	20
5.1	Μέθοδος Euler	20
5.2	Μέθοδος Runge Kutta 4ης τάξης	21
5.3	Σύγκριση Μεθόδων	21
6	Επίλυση Γραμμικού Συστήματος Εξισώσεων	23
6.1	Μέθοδος Gauss	23
6.2	Μέθοδος Gauss-Seidel	24
6.3	Μέθοδος με τριδιαγώνιο πίνακα	24

Κατάλογος σχημάτων

1	Η συνάρτηση $f(x)$	1
2	Η παράγωγος της συνάρτησης $g(x) = \frac{-x^5 + 5x^3 + 6}{9}$	5
3	Η παράγωγος της συνάρτησης $g_2(x) = 6 + 5x^3 - 9x$	8
4	Η παράγωγος της συνάρτησης $g_3(x) = (\frac{x^5 + 9x - 6}{5})^{1/3}$. .	8
5	Η συνάρτηση $f(x)$ και το πολυώνυμο Taylor	10
6	Το πολυώνυμο Taylor	11
7	Η διαφορά της $f(x)$ και του πολυωνύμου Taylor	11
8	Πολυωνυμική παρεμβολή με πολυώνυμο 3ου βαθμού . . .	12
9	Πολυωνυμική παρεμβολή με πολυώνυμο 5ου βαθμού . . .	13
10	Τα σημεία του αρχείου 200600237.dat	15
11	Η παράγωγος $f'(x)$ των 3 σημείων	16
12	Η παράγωγος $f'(x)$ των 5 σημείων	17
13	Η παράγωγος $f'(x)$ των 7 σημείων	18
14	Μέθοδοι Euler και Runge Kutta 4ης τάξης	22
15	Το σχετικό σφάλμα της Euler ως προς την Runge Kutta .	22

1 Εύρεση Ριζών Εξίσωσης

Στην πρώτη άσκηση της εργασίας βρίσκουμε τις ρίζες της εξίσωσης $x^5 - 5 \cdot x^3 + 9 \cdot x - 6 = 0$ με τη μέθοδο διχοτόμησης, τη μέθοδο Newton και τη μέθοδο σταθερού σημείου.



Σχήμα 1: Η συνάρτηση $f(x)$

1.1 Μέθοδος Διχοτόμησης

Η μέθοδος διχοτόμησης είναι αλγόριθμος για την εύρεση ρίζας μιας συνεχούς συνάρτησης σε κλειστό διάστημα $[a,b]$, χρησιμοποιώντας διαδοχικές δοκιμές, οι οποίες προσεγγίζουν όλο και με μεγαλύτερη ακρίβεια τη ρίζα. Στηρίζεται στο θεώρημα Bolzano, σύμφωνα με το οποίο, αν μία συνάρτηση $f(x)$ είναι συνεχής σε ένα κλειστό διάστημα $[a,b]$ και ισχύει $f(a) \cdot f(b) < 0$, τότε υπάρχει τουλάχιστον ένας πραγματικός αριθμός $\rho \in (a, b)$, που είναι ρίζα της εξίσωσης.

Ο αλγόριθμος της μέθοδου διχοτόμησης αρχίζει με ένα διάστημα (x_1, x_2) , στο οποίο η συνάρτηση αλλάζει πρόσημο και επιλέγουμε το μέσο x_3 , για το οποίο βρίσκουμε την τιμή της συνάρτησης. Αν

$$f(x_1) \cdot f(x_3) = \begin{cases} < 0 & \text{τότε αλλάζει το πρόσημο στο } (x_1, x_3) \\ > 0 & \text{τότε αλλάζει το πρόσημο στο } (x_3, x_2) \\ = 0 & \text{τότε το } x_3 \text{ είναι ρίζα} \end{cases}$$

Συνεχόμενες διχοτομήσεις μειώνουν το διάστημα που περιέχει τη ρίζα, μέχρι να την προσεγγίσουμε με την επιθυμητή ακρίβεια.

Το πλεονέκτημα της μεθόδου είναι πως βρίσκει σίγουρα μία προσέγγιση της ρίζας, για δεδομένη ακρίβεια, σε ορισμένο αριθμό επαναλήψεων. Συγκεκριμένα, έστω $[a, b]$ το διάστημα μέσα στο οποίο βρίσκεται μία ρίζα και δ η επιθυμητή ακρίβεια. Στο πρώτο βήμα η λύση βρίσκεται στο διάστημα $[a, b]$. Στο επόμενο βήμα, εφόσον δεν βρέθηκε λύση, το διάστημα μέσα στο οποίο βρίσκεται η λύση είναι $\frac{|b-a|}{2}$. Στη n -ιοστή επανάληψη, η λύση πρέπει να βρίσκεται μέσα στο διάστημα $|b^{(n)} - a^{(n)}| = \frac{|b-a|}{2^n}$, το οποίο είναι μικρότερο ή ίσο της επιθυμητής ακρίβειας δ .

Από το γράφημα της $f(x)$ επιλέγουμε το διάστημα $[1, 3]$ ως είσοδο στο πρόγραμμα `bisection.sci`, το οποίο εκτελεί τη μέθοδο διχοτόμησης. Με ακρίβεια 4 δεκαδικών ψηφίων, $\delta = 10^{-4}$, υπολογίζουμε τον αριθμό των επαναλήψεων για την εύρεση της ρίζας, σύμφωνα με τον παραπάνω τύπο. Έχουμε λοιπόν $\frac{|b-a|}{2^n} \leq \delta \Leftrightarrow n \geq \log_2 \frac{|b-a|}{\delta} = \log_2 \frac{2}{10^{-4}} \approx 14$ τουλάχιστον επαναλήψεις.

Πράγματι, το πρόγραμμα υπολογίζει τη ρίζα $\rho=1.8049$ μετά από 15 επαναλήψεις, ενώ η πορεία σύγκλισης φαίνεται στον επόμενο πίνακα.

N	A	B	C	F(a)	F(c)	F(b)
1	1.0000	3.0000	2.0000	-1.0000	4.0000	129.0000
2	1.0000	2.0000	1.5000	-1.0000	-1.7813	4.0000
3	1.5000	2.0000	1.7500	-1.7813	-0.6338	4.0000
4	1.7500	2.0000	1.8750	-0.6338	1.0903	4.0000
5	1.7500	1.8750	1.8125	-0.6338	0.1017	1.0903
6	1.7500	1.8125	1.7813	-0.6338	-0.2951	0.1017
7	1.7813	1.8125	1.7969	-0.2951	-0.1043	0.1017
8	1.7969	1.8125	1.8047	-0.1043	-0.0032	0.1017
9	1.8047	1.8125	1.8086	-0.0032	0.0488	0.1017
10	1.8047	1.8086	1.8066	-0.0032	0.0227	0.0488
11	1.8047	1.8066	1.8057	-0.0032	0.0097	0.0227
12	1.8047	1.8057	1.8052	-0.0032	0.0032	0.0097
13	1.8047	1.8052	1.8049	-0.0032	0.0000	0.0032
14	1.8047	1.8049	1.8048	-0.0032	-0.0016	0.0000
15	1.8048	1.8049	1.8049	-0.0016	-0.0008	0.0000

1.2 Μέθοδος Newton

Η μέθοδος Newton είναι αλγόριθμος που με διαδοχικές επαναλήψεις, υπολογίζει όλο και καλύτερες προσεγγίσεις της ρίζας. Αν η $f(x)$ είναι συνεχής και έχει την πρώτη παράγωγο συνεχή, τότε ξεκινάμε με μια αρχική πρόβλεψη για τη ρίζα και χρησιμοποιώντας τον τύπο $x_1 = x_o - \frac{f(x_o)}{f'(x_o)}$, όπου το x_1 είναι το σημείο τομής της εφαπτομένης της f που διέρχεται από το $(x_o, f(x_o))$ με τον άξονα x . Η διαδικασία γενικεύεται ως $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$.

Εισάγοντας μια αρχική πρόβλεψη για τη ρίζα στο πρόγραμμα newton.sci, βλέπουμε τις διαδοχικές προσεγγίσεις, μέχρι να φτάσουμε στην επιθυμητή ακρίβεια. Για $\rho=3$, έχουμε τον παρακάτω πίνακα:

N	x	$f(x)$
1	2.5376	40.3635
2	2.2006	12.1265
3	1.9744	3.2889
4	1.8503	0.6664
5	1.8093	0.0579
6	1.8050	0.0006
7	1.8049	0.0000

Η μέθοδος αποτυγχάνει όταν η αρχική μας πρόβλεψη δεν είναι καλή, δηλαδή σε σημεία που η f απειρίζεται, ή η παράγωγος της είναι μηδέν. Από το γράφημα βλέπουμε πως υπάρχουν τέτοια σημεία και αν τα εισάγουμε στο πρόγραμμα, θα δώσει σφάλμα.

1.3 Μέθοδος Σταθερού Σημείου

Η μέθοδος Σταθερού σημείου μετατρέπει την εξίσωση $f(x) = 0$ (1) στη μορφή $g(x) = x$ (2), έτσι ώστε η λύση της (2), που είναι σταθερό σημείο της $g(x)$, να είναι και λύση της (1). Ο αλγόριθμος που εφαρμόζεται είναι: επιλέγουμε ένα τυχαίο σημείο x_o , εφαρμόζουμε τον αναδρομικό τύπο $x_{n+1} = g(x_n)$, και αν η f είναι συνεχής και η ακολουθία x_n προσεγγίζει ένα σημείο l_o , τότε αυτό είναι σταθερό σημείο της $g(x)$ και λύση της $f(x)$.

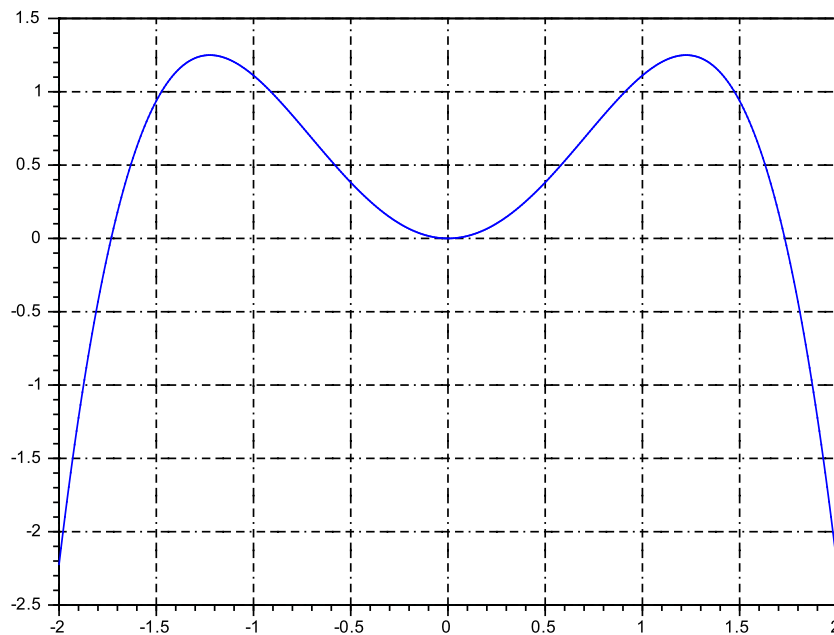
Η σύγκλιση της μεθόδου στηρίζεται στο επόμενο θεώρημα, που είναι αποτέλεσμα του θεωρήματος μέσης τιμής. Αν $g(x)$ είναι μια παραγωγίσιμη συνάρτηση με $|g'(x)| < 1, \forall x \in [a, b]$, τότε η g έχει ακριβώς ένα σταθερό σημείο l_o στο $[a, b]$ και ο παραπάνω αναδρομικός τύπος συγχλίνει στο l_o , εφόσον το αρχικό σημείο $x_o \in [a, b]$.

Μπορούμε να υπολογίσουμε το μέγιστο αριθμό επαναλήψεων που απαιτούνται για σύγκλιση, βασιζόμενοι στο Θεώρημα Μέσης τιμής, σύμφωνα με το οποίο $\forall x, y \in [a, b]$, υπάρχει αριθμός $\eta \in [a, b]$, τέτοιος ώστε $|g(x) - g(y)| = |g'(\eta)(x - y)| = |g'(\eta)| \cdot |x - y|$.

Ο αριθμός των επαναλήψεων N υπολογίζεται χρησιμοποιώντας τον τύπο $N = -\frac{\ln \varepsilon - \ln \frac{|x_1 - x_o|}{(1 - L)}}{\ln L}$, όπου L η μέγιστη τιμή του $g'(\eta)$, x_o η αρχική πρόβλεψη της ρίζας, x_1 η τιμή $g(x_o)$ και $\varepsilon = 10^{-4}$ η επιθυμητή ακρίβεια.

Η πρώτη μετατροπή της $f(x) = 0$ είναι η $g(x) = \frac{-x^5 + 5x^3 + 6}{9}$, με

παράγωγο $g'(x) = -\frac{5}{9}x^2(x^2 - 3)$, το διάγραμμα της οποίας φαίνεται παρακάτω.



Σχήμα 2: Η παράγωγος της συνάρτησης $g(x) = \frac{-x^5 + 5x^3 + 6}{9}$

Σύμφωνα με τα παραπάνω θεωρήματα, επιλέγουμε το διάστημα $[1.5, 1.86]$, όπου ισχύει $|g'(x)| < 1$, ώστε να εξασφαλίζεται η ύπαρξη σταθερού σημείου. Στα άκρα του διαστήματος είναι $g'(1.5) = 0.9375$ και $g'(1.86) = -0.08834$, επομένως, από το θεώρημα μέσης τιμής έχουμε $g'(1.86) \leq g'(\eta) \leq g'(1.5)$, άρα $L = g'(1.5) = 0.9375$.

Αντικαθιστώντας στον παραπάνω τύπο με $x_0 = 1.5$, βρίσκουμε ότι θα χρειαστούμε το πολύ 161 επαναλήψεις, για να προσεγγίσουμε τη ρίζα με ακρίβεια 4 δεκαδικών ψηφίων.

Το πρόγραμμα `fixedpoint1.sci` με αρχική πρόβλεψη $\rho=1.5$, δίνει τον επόμενο πίνακα:

Ρίζα
1.5
1.697916667
1.818112911
1.79816198
1.807928954
1.803501055
1.805591424
1.804621839
1.805075393
1.804864055
1.804962711

Σε 10 επαναλήψεις βρήκε προσέγγιση της ρίζας.

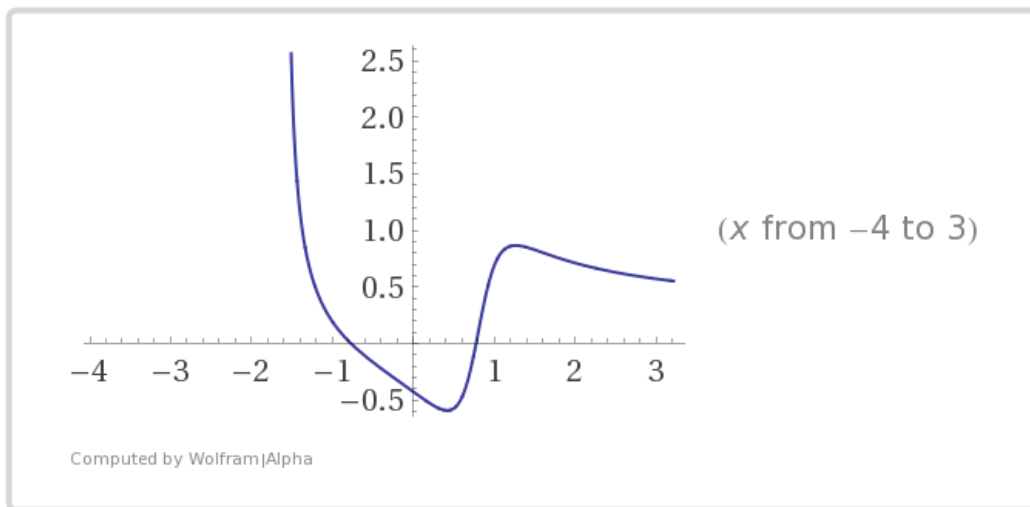
Ακολουθούμε την παραπάνω διαδικασία και για τις περιπτώσεις $g_2(x) = (6 + 5x^3 - 9x)^{1/5}$ και $g_3(x) = (\frac{x^5 + 9x - 6}{5})^{1/3}$. Για την $g_2(x)$ η θεωρητική πρόβλεψη στο διάστημα $[1,2]$ δίνει $N=27$ το πολύ επαναλήψεις για την απαραίτητη ακρίβεια, ενώ τελικά χρειαστήκαμε 14. Ο θεωρητικός τύπος δίνει απλώς ένα ανώτατο όριο στην εκτίμηση των επαναλήψεων.

Για την $g_3(x)$ βλέπουμε πως παίρνουμε μιγαδικές λύσεις. Ο λόγος είναι πως δεν ισχύει $|g'(x)| < 1$ για το πραγματικό μέρος στο διάστημα που υπάρχει η πραγματική ρίζα, όπως φαίνεται στο σχήμα 4. Ισχύει όμως για το μιγαδικό μέρος, γι' αυτό και βρίσκουμε τη μιγαδική ρίζα.

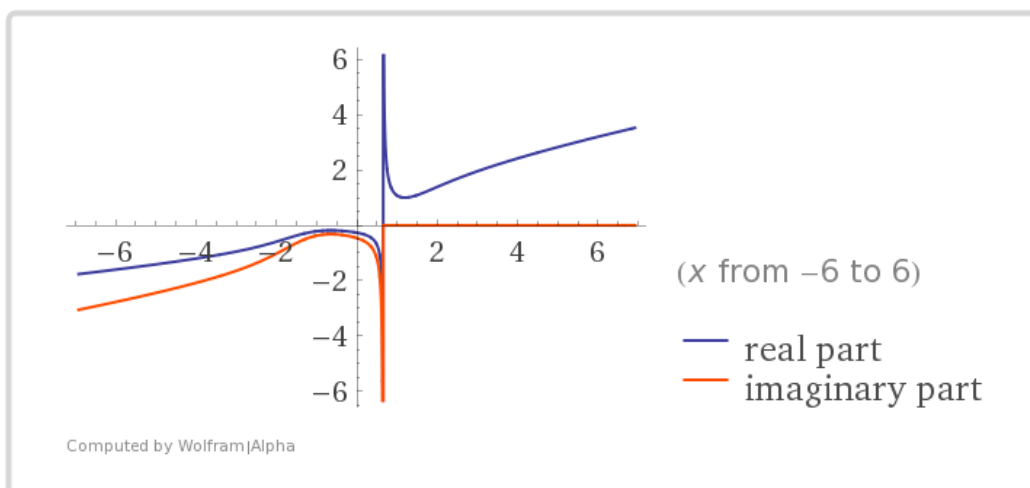
Ως κριτήριο σύγκλισης χρησιμοποιήσαμε το $|x_n - x_{n-1}| < 10^{-4}$, επειδή η ρίζα δεν είναι κοντά στο μηδέν, επομένως το απόλυτο σφάλμα μας δίνει τουλάχιστον 3 σωστά ψηφία μετά την υποδιαστολή. Αν η ρίζα ήταν κοντά στο μηδέν, τότε θα έπρε να χρησιμοποιήσουμε το σχετικό σφάλμα $|\frac{x_n - x_{n-1}}{x_n}| < 10^{-4}$.

Τα αποτελέσματα φαίνονται στους επόμενους πίνακες:

$g_2(x)$	$g_3(x)$
1.	1.
1.148698355	0.928317767
1.265077061	0.847562011
1.364932895	0.744755901
1.450926543	0.571220669
1.523741201	0.271237771 + 0.469797600i
1.584110866	0.749242887 + 0.708303866i
1.633176011	0.897676869 + 0.531566928i
1.672378781	0.919538341 + 0.459415064i
1.703267798	0.922392963 + 0.418811131i
1.727337763	0.918107669 + 0.393724661i
1.745932172	0.910990514 + 0.378169301i
1.760200729	0.903181137 + 0.369082675i
1.771093714	0.895899983 + 0.364516926i
1.779377187	0.889837669 + 0.363024425i
1.785657566	0.885298324 + 0.363444975i
1.790408516	0.882283103 + 0.364856589i
1.793996374	0.880578998 + 0.366581653i
1.796702398	0.879860619 + 0.368187481i
1.798741352	0.879784887 + 0.369456466i
1.800276555	0.880057269 + 0.370330619i
1.801431832	0.880462346 + 0.370849007i
1.802300845	0.880865437 + 0.371094565i
1.802954325	0.881197857 + 0.371157733i
1.803445613	0.881436836 + 0.371116535i
1.8038149	0.881586923 + 0.371028884i
1.804092446	0.881665730 + 0.370932382i
1.804301021	0.881694476 + 0.370847799i
1.804457752	
1.80457552	
1.804664007	



Σχήμα 3: Η παράγωγος της συνάρτησης $g_2(x) = 6 + 5x^3 - 9x$



Σχήμα 4: Η παράγωγος της συνάρτησης $g_3(x) = \left(\frac{x^5 + 9x - 6}{5}\right)^{1/3}$

1.4 Σύγκριση Μεθόδων

Από τα παραπάνω βλέπουμε πως η μέθοδος Newton συγκλίνει γρηγορότερα από τις άλλες στη ρίζα, επειδή παρουσιάζει τετραγωνική απόκλιση. Το μειονέκτημα της είναι πως η λανθασμένη επιλογή αρχικού σημείου μπορεί να οδηγήσει σε απόκλιση.

Η μέθοδος διχοτόμησης συγκλίνει με γραμμικό ρυθμό, όμως εγγυάται την εύρεση ρίζας σε ένα διάστημα και μάλιστα σε προβλεπόμενο αριθμό επαναλήψεων.

Η σύγκλιση της μεθόδου σταθερού σημείου εξαρτάται από τη συναρτηση $g(x)$ και το αρχικό σημείο x_0 , ενώ ο ρυθμός σύγκλισης είναι γραμμικός.

2 Πολυωνυμική Παρεμβολή

Η πολυωνυμική παρεμβολή είναι η εύρεση ενός πολυωνύμου που διέρχεται από ένα σύνολο σημείων. Η μέθοδος στηρίζεται στο Θεώρημα Weierstrass, σύμφωνα με το οποίο αν μία συνάρτηση $f(x)$ είναι συνεχής στο διάστημα $[a,b]$, τότε για κάθε $\varepsilon > 0$, υπάρχει πολυώνυμο $P(x)$, τέτοιο ώστε $|f(x) - P(x)| \leq \varepsilon, \forall x \in [a,b]$.

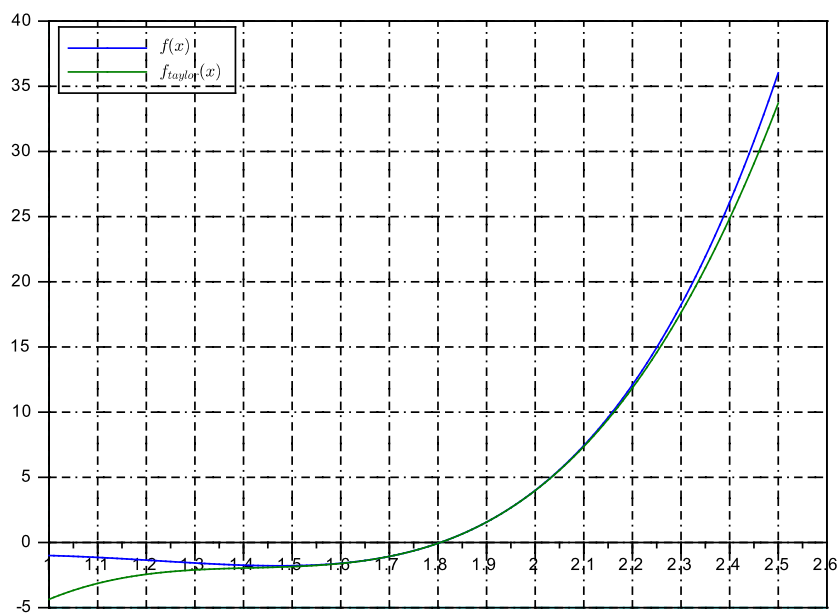
Στην εργασία κάνουμε πολυωνυμική παρεμβολή με πολυώνυμο Taylor 3ου βαθμού γύρω από τη ρίζα της συνάρτησης $f(x)$ του προηγούμενου ερωτήματος και παρεμβολή των σημείων του αρχείου 200600237.dat με πολυώνυμα Lagrange 3ου και 5ου βαθμού.

2.1 Πολυωνυμική Παρεμβολή με πολυώνυμο Taylor

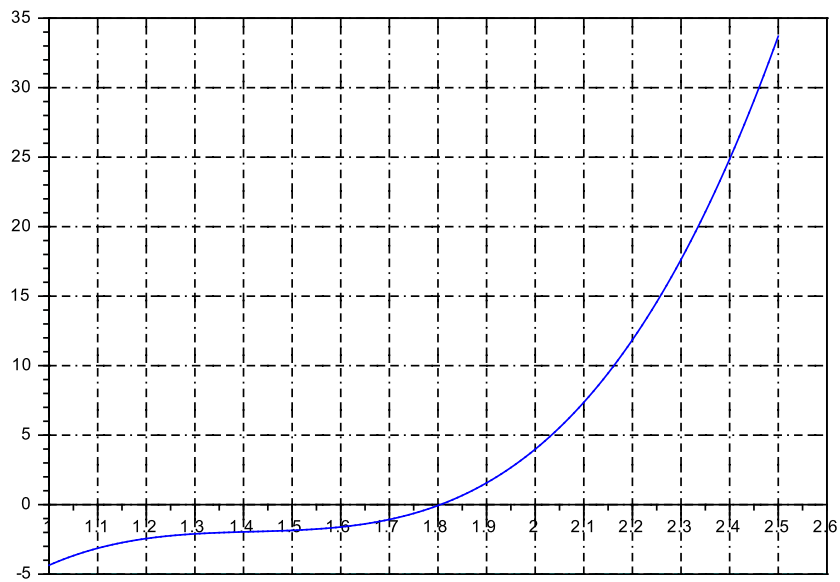
Η τιμή μιας συνάρτησης $f(x)$ σε ένα σημείο a προσεγγίζεται από το ανάπτυγμα Taylor της $f(x)$ στο σημείο αυτό, οπότε το πολυώνυμο Taylor 3ου βαθμού είναι $f(a+h) = f(a) + \frac{f'(a)}{1!}h + \frac{f''(a)}{2!}h^2 + \frac{f^{(3)}(a)}{3!}h^3$.

Επιλέγουμε ως σημείο παρεμβολής της $f(x)$ τη ρίζα $\rho=1.8049$ και την εισάγουμε στο πρόγραμμα taylor.sci, δίνοντας τα διαγράμματα της αρχικής συνάρτησης, του πολυώνυμου Taylor και της διαφοράς τους.

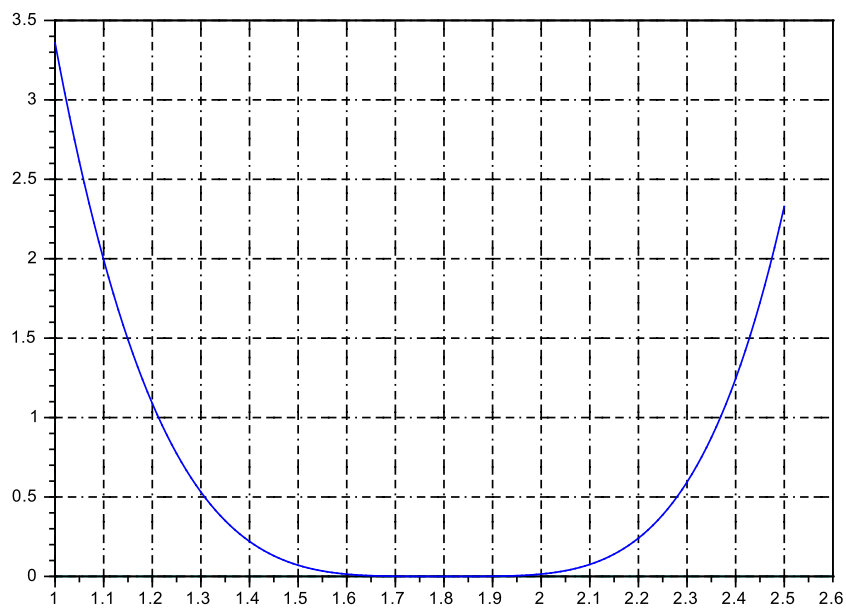
Στα διαγράμματα βλέπουμε πως η προσέγγιση είναι ικανοποιητική μόνο στην περιοχή γύρω από τη ρίζα, γεγονός αναμενόμενο από τον ορισμό της σειράς Taylor. Αυτός είναι ο λόγος που τα πολυώνυμα Taylor δεν χρησιμοποιούνται ευρέως για τις προσεγγίσεις συναρτήσεων.



Σχήμα 5: Η συνάρτηση $f(x)$ και το πολυώνυμο Taylor



Σχήμα 6: Το πολυώνυμο Taylor



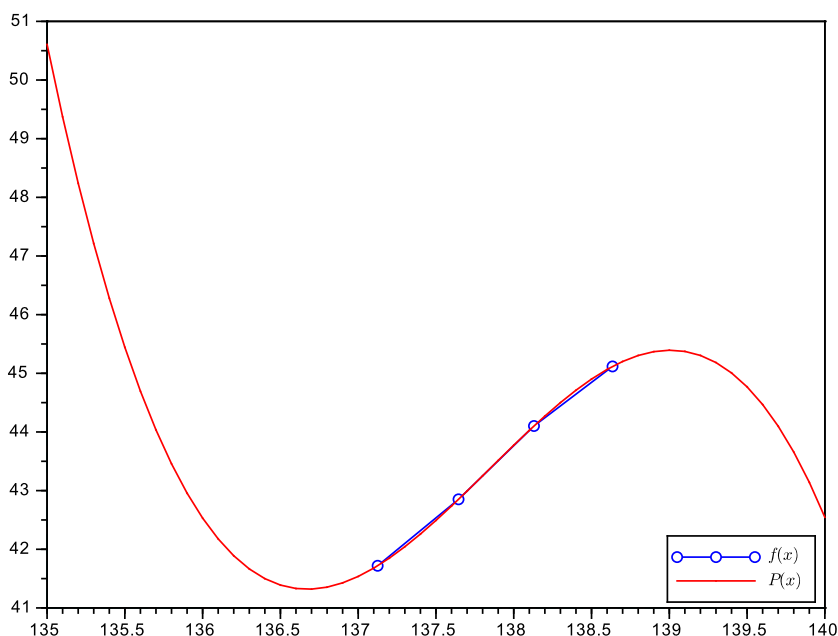
Σχήμα 7: Η διαφορά της $f(x)$ και του πολυωνύμου Taylor

2.2 Πολυωνυμική Παρεμβολή με πολυώνυμο Lagrange

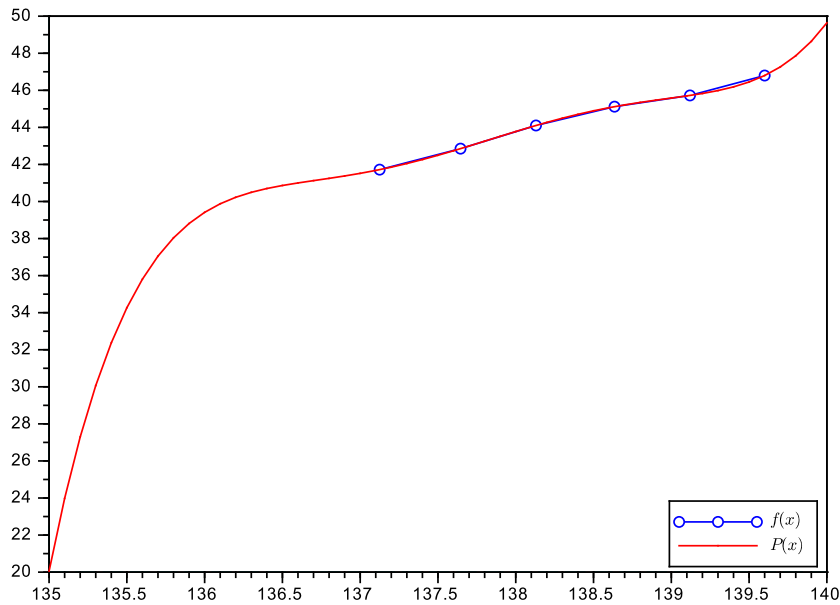
Το πολυώνυμο Lagrange n -βαθμού είναι το πολυώνυμο $P(x)$ που διέρχεται από $n+1$ σημεία $(x_1, f(x_1), \dots, x_{n+1}, f(x_{n+1}))$ και ορίζεται ως εξής: $P(x) = \sum_{j=1}^n P_j(x)$, όπου $P_j(x) = f(x_j) \cdot \prod_{k=1, k \neq j}^n \frac{x - x_k}{x_j - x_k}$.

Χρησιμοποιείται όταν θέλουμε να προσεγγίσουμε μια άγνωστη συνάρτηση, ενώ έχουμε κάποιο αριθμό σημείων.

Στο πρόγραμμα `lagrange.sci` εισάγουμε το διάστημα που θέλουμε να γίνει η παρεμβολή, τα σημεία που θα διέρχεται το πολυώνυμο και το βαθμό του πολυωνύμου. Οι γραφικές παραστάσεις για $n=3$ και $n=5$ φαίνονται παρακάτω.



Σχήμα 8: Πολυωνυμική παρεμβολή με πολυώνυμο 3ου βαθμού



Σχήμα 9: Πολυωνυμική παρεμβολή με πολυώνυμο 5ου βαθμού

Βλέπουμε πως στην περιοχή που ορίσαμε τα πολυώνυμα ταυτίζονται με τα σημεία της άγνωστης συνάρτησης.

3 Αριθμητική Παραγωγή

Αριθμητική παραγωγή είναι η εύρεση της τιμής της παραγώγου μιας συνάρτησης $f(x)$ σε ένα σημείο, χρησιμοποιώντας την τιμή της συνάρτησης σε αυτό το σημείο. Οι μαθηματικοί τύποι που χρησιμοποιούνται στηρίζονται στη σειρά Taylor της $f(x)$ και αποδεικνύονται παρακάτω για κάθε μία περίπτωση.

3.1 Αριθμητική Παραγωγή 3 σημείων

Η σειρά Taylor μιας συνάρτησης $f(x)$ γύρω από ένα σημείο x_0 είναι:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + f'(x_0) \cdot h + \frac{f^{(2)}(x_0)}{2!} \cdot h^2 + \frac{f^{(3)}(x_0)}{3!} \cdot h^3 \quad (1),$$

όπου κρατάμε όρους μέχρι 3ης τάξης. Αντίστοιχα, η σειρά Taylor για

$h < 0$ είναι:

$$f(x_o - h) = f(x_o) - f'(x_o) \cdot h + \frac{f^{(2)}}{2!} \cdot h^2 - \frac{f^{(3)}}{3!} \cdot h^3 \quad (2).$$

Αφαιρώντας την (1) από την (2) έχουμε:

$$f'(x) = \frac{f(x_o + h) - f(x_o - h)}{2 \cdot h} - \frac{f^{(3)}(x_o)}{3!} \cdot h^2 \quad (3)$$

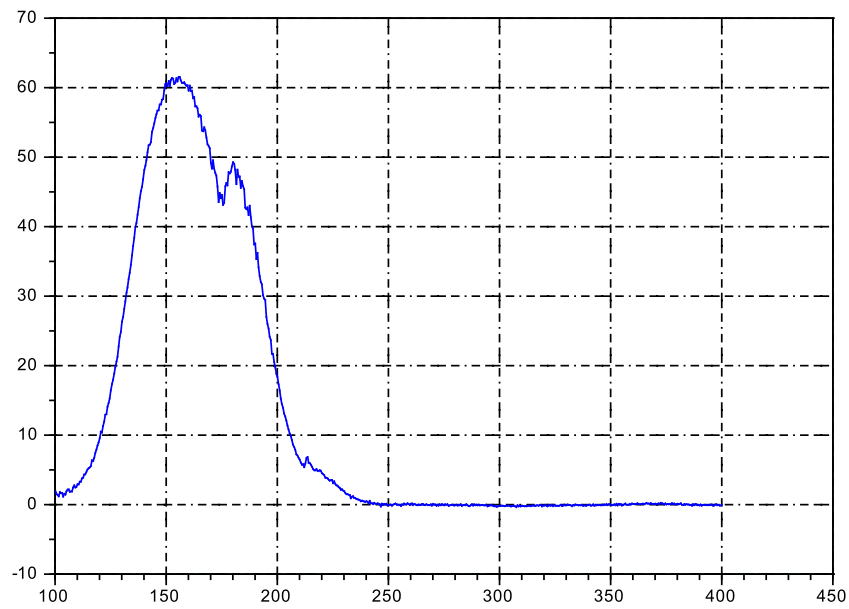
Από την (1) και (2) προκύπτουν επίσης οι εξής τύποι για τον υπολογισμό της παραγωγού στο σημείο x_o :

$$f'(x_o) = \frac{f(x_o + h) - f(x_o)}{h} - \frac{f''()}{2!} \cdot h \quad (4) \text{ και}$$

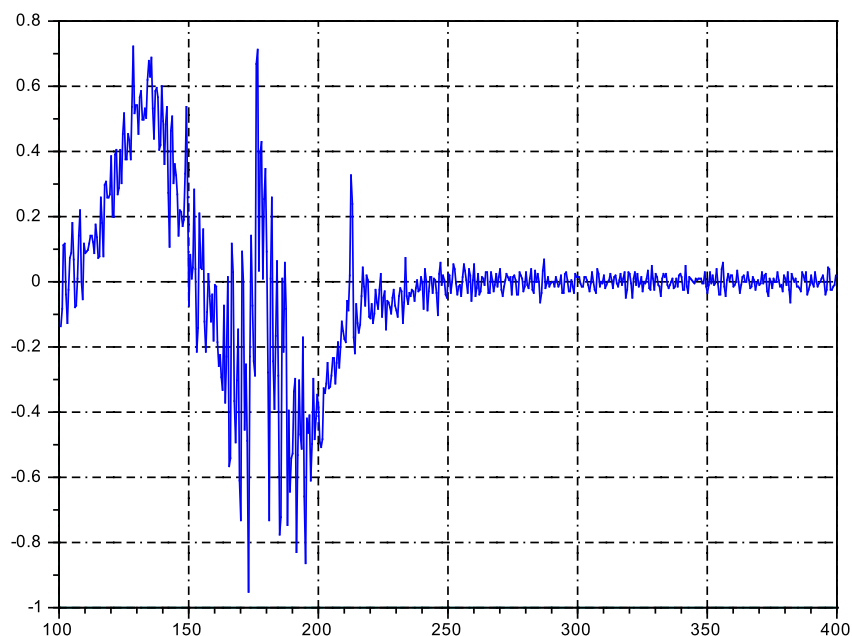
$$f'(x_o) = \frac{f(x_o) - f(x_o - h)}{h} + \frac{f''()}{2!} \cdot h \quad (5)$$

Στο πρόγραμμα numdif.sci χρησιμοποιήσαμε την (3), επειδή το σφάλμα αποκοπής (truncation error) είναι ανάλογο του h^2 , άρα μικρότερο σε σχέση με το σφάλμα των (4) και (5).

Η αριθμητική παραγωγή γίνεται στα σημεία του αρχείου 200600237.dat και επειδή τα σημεία δεν ισαπέχουν μεταξύ τους, το πρόγραμμα αρχικά υπολογίζει το μέσο βήμα h , ώστε να ισχύουν οι παραπάνω τύποι.



Σχήμα 10: Τα σημεία του αρχείου 200600237.dat



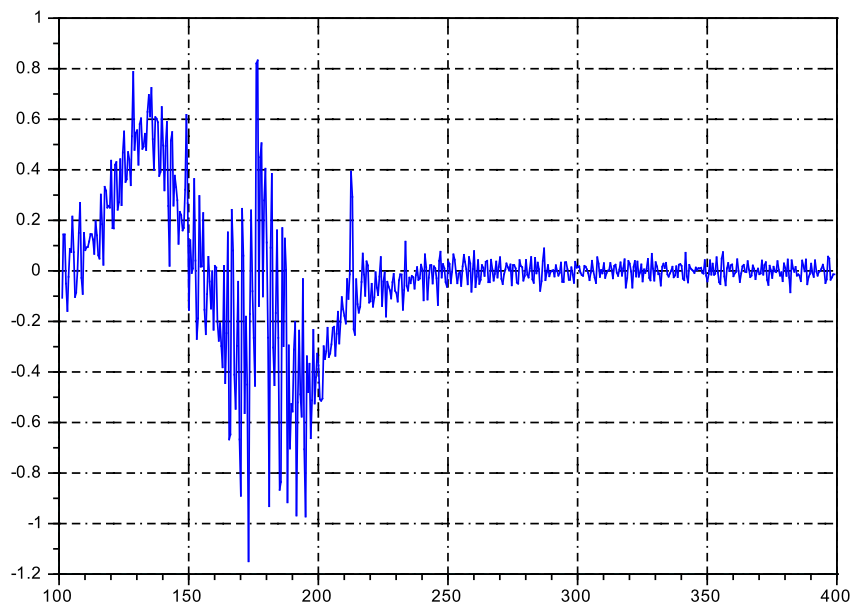
Σχήμα 11: Η παράγωγος $f'(x)$ των 3 σημείων

3.2 Αριθμητική Παραγωγή 5 σημείων

Υπολογίζουμε τη σειρά Taylor της συνάρτησης $f(x)$ στα σημεία $(x_o + / - 2h)$ και $(x_o + / - h)$ και κρατώντας όρους μέχρι και 5ης τάξης, βρίσκουμε:

$$f'(x_o) = \frac{f(x_o - 2h) - 8f(x_o - h) + 8f(x_o + h) - f(x_o + 2h)}{12h} + \frac{h^4}{30}f^{(5)}(\xi)$$

Το πρόγραμμα παράγει το επόμενο διάγραμμα:



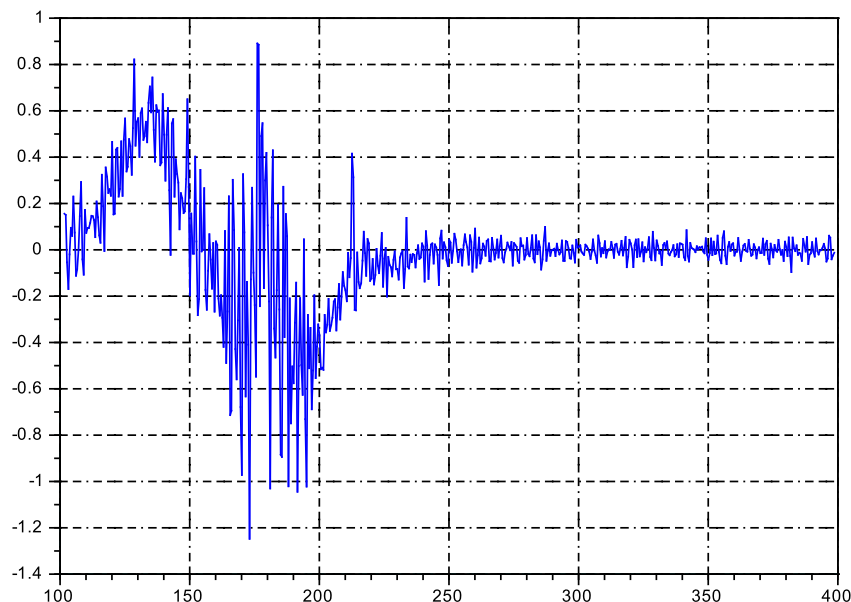
Σχήμα 12: Η παράγωγος $f'(x)$ των 5 σημείων

3.3 Αριθμητική Παραγωγή 7 σημείων

Υπολογίζουμε τη σειρά Taylor της συνάρτησης $f(x)$ στα σημεία $(x_o + / - 3h)$, $(x_o + / - 2h)$ και $(x_o + / - h)$ και κρατώντας όρους μέχρι και 5ης τάξης, βρίσκουμε:

$$f'(x_o) = \frac{-f(x_o - 3h) + 9f(x_o - 2h) - 45f(x_o - h) + 45f(x_o + h) - 9f(x_o + 2h) + f(x_o + 3h)}{60h} + Ah^6 f^{(7)}(\xi)$$

Το πρόγραμμα παράγει το επόμενο διάγραμμα:



Σχήμα 13: Η παράγωγος $f'(x)$ των 7 σημείων

3.4 Σύγκριση Μεθόδων

Η μορφή της καμπύλης είναι ίδια και στις 3 περιπτώσεις, ενώ βλέπουμε πως η μέθοδος είναι επιρρεπής σε σημεία που αλλάζει απότομα τιμές η συνάρτηση $f(x)$.

Όσον αφορά την καταλληλότητα της μεθόδου, χρησιμοποιώντας περισσότερα σημεία στον υπολογισμό πετυχαίνουμε μεγαλύτερη ακρίβεια, εισάγονται όμως περισσότεροι υπολογισμοί και σφάλματα στρογγυλοποίησης. Επομένως, από αυτή την άποψη, η μέθοδος 3 σημείων είναι προτιμότερη.

4 Αριθμητική Ολοκλήρωση

Στην άσκηση αυτή υπολογίζουμε το ολοκλήρωμα της καμπύλης που σχηματίζουν τα σημεία του αρχείου 200600237.dat με τις μεθόδους τραπεζίου, Simpson 1/3 και Simpson 3/8.

Οι τρεις μέθοδοι βασίζονται στους τύπους Newton-Cotes, οι οποίοι

προκύπτουν από την ολοκλήρωση πολυωνύμων Lagrange που προσεγγίζουν τη συνάρτηση $f(x)$ που θέλουμε να ολοκληρώσουμε. Το διάστημα ολοκλήρωσης είναι $h = \frac{(b-a)}{n}$, όπου n ο αριθμός των διαστημάτων που σχηματίζουν $n+1$ σημεία. Ανάλογα με το βαθμό του πολυωνύμου που επιλέγουμε, ακολουθούμε και την αντίστοιχη μέθοδο.

4.1 Μέθοδος Τραπεζίου

Αν επιλέξουμε 2 σημεία $(x_1, f(x_1), (x_2, f(x_2)))$ με $x_2 = x_1 + h$, τότε το πολυώνυμο Lagrange που διέρχεται από αυτά, είναι:

$$P_2(x) = \frac{x-x_2}{x_1-x_2}f_1 + \frac{x-x_1}{x_2-x_1}f_2 = \frac{x-x_1-h}{h}f_1 + \frac{x-x_1}{h}f_2 = \frac{x}{h}(f_2-f_1) + (f_1 + \frac{x_1}{h}f_2)$$

και ολοκληρώνοντας στο διάστημα $[x_1, x_1+h]$, έχουμε:

$$\int_{x_1}^{x_1+h} P_2(x)dx = \frac{1}{2}h(f_1 + f_2) - \frac{1}{12}h^3 f''(\xi)$$

Αυτός είναι ο κανόνας του τραπεζίου και ο δεύτερος όρος δίνει το σφάλμα του υπολογισμού.

Το πρόγραμμα trapezoid.sci υπολογίζει το εμβαδόν της καμπύλης που σχηματίζεται από τα σημεία του αρχείου (Σχήμα 10) και δίνει αποτέλεσμα $I = 3710.854523$. Το σφάλμα είναι ανάλογο του $h^3 = (0.49965)^3$, όπως υπολογίζεται από το πρόγραμμα.

4.2 Μέθοδος Simpson 1/3

Η μέθοδος Simpson 1/3 προκύπτει με την ίδια διαδικασία που ακολουθήσαμε στη μέθοδο τραπεζίου, μόνο που επιλέγουμε 3 σημεία. Επομένως, το πολυώνυμο Lagrange είναι:

$$P_3 = \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)}f_1 + \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)}f_2 + \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)}f_3 = \frac{1}{2}(x_1+h)(x_1+2h)f_1 + x_1(x_1+2h)f_2 + \frac{1}{2}x_1(x_1+h)f_3$$

και ολοκληρώνοντας στο $[x_1, x_3]$, έχουμε:

$$\int_{x_1}^{x_1+2h} P_3(x)dx = \frac{1}{3}h(f_1 + 4f_2 + f_3) - \frac{1}{90}h^5 f^{(4)}(\xi)$$

Το πρόγραμμα simpsons.sci υπολογίζει σε αυτή την περίπτωση $I = 3708.407734$, χρησιμοποιώντας το μέσο βήμα h , αφού τα σημεία δεν ισαπέχουν μεταξύ τους. Το σφάλμα είναι ανάλογο του $h^5 = (0.49965)^5$.

4.3 Μέθοδος Simpson 3/8

Η μέθοδος Simpsons 3/8 προκύπτει με την ίδια διαδικασία, επιλέγοντας 4 σημεία $((x_1, f(x_1)), (x_2, f(x_2)), (x_3, f(x_3)), (x_4, f(x_4)))$, με $x_2 = x_1 + h$, $x_3 = x_1 + 2h$ και $x_4 = x_1 + 3h$, δίνοντας κατά τα γνωστά:

$$\int_{x_1}^{x_4} P_4(x) dx = \frac{3}{8}h(f_1 + 3f_2 + 3f_3 + f_4) - \frac{3}{80}h^5 f^{(4)}(\xi)$$

Το πρόγραμμα simpsons.sci δίνει αποτέλεσμα $I = 3710.596156$, με σφάλμα ανάλογο του $(0.49965)^5$.

4.4 Σύγκριση Μεθόδων

Αν τα σημεία μας δεν ισαπέχουν, τότε προτιμότερη μέθοδος είναι του τραπεζίου. Σε άλλες περιπτώσεις, οι μέθοδοι Simpson 1/3 και 3/8 είναι ακριβέστερες, αφού τα σφάλματα είναι ανάλογα του h^5 . Όσον αφορά αυτές τις δύο, η μέθοδος 3/8 είναι πιο ακριβής, αλλά όσο αυξάνονται τα σημεία της καμπύλης, αυξάνονται και οι πράξεις που πρέπει να γίνουν.

5 Αριθμητική επίλυση Διαφορικής Εξίσωσης

Στην άσκηση λύνουμε αριθμητικά τη διαφορική $\dot{y} = \exp(-yt) - 5 \sin(yt)$, $1 \leq t \leq 2$, με αρχική συνθήκη $y(1) = 0$, με τις μεθόδους Euler και Runge Kutta 4ης τάξης.

5.1 Μέθοδος Euler

Η μέθοδος Euler χρησιμοποιείται στην αριθμητική επίλυση συνήθων διαφορικών με κάποια αρχική συνθήκη, χρησιμοποιώντας τον γενικό τύπο $y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n)$, με βήμα $x_{n+1} = x_n + h$. Ο τύπος αποδεικνύεται με διάφορους τρόπους, όπως το ανάπτυγμα Taylor της y γύρω από το σημείο t_o , $y(t_o + h) = y(t_o) + hy'(t_o)$, όπου με αντικατάσταση του $y'(t_o) = f(t, y)$ καταλήγουμε στον παραπάνω τύπο.

Το πρόγραμμα eulerrk.sci υλοποιεί την Euler και την Runge Kutta 4ης τάξης και τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στη Σύγκριση των μεθόδων.

5.2 Μέθοδος Runge Kutta 4ης τάξης

Η μέθοδος Runge Kutta 4ης τάξης χρησιμοποιείται για την επίλυση συνήθων διαφορικών εξισώσεων με αρχική συνθήκη, με τον αναδρομικό τύπο $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$ (1), όπου

$k_1 = f(t_n, y_n)$, η προσαύξηση που εξαρτάται από την κλίση στην αρχή του διαστήματος

$k_2 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + h\frac{1}{2}k_1)$, η προσαύξηση που εξαρτάται από την κλίση στο μέσο του διαστήματος

$k_3 = f(t_n + \frac{1}{2}h, y_n + h\frac{1}{2}k_2)$

, η προσαύξηση που εξαρτάται από την κλίση στο μέσο του διαστήματος,

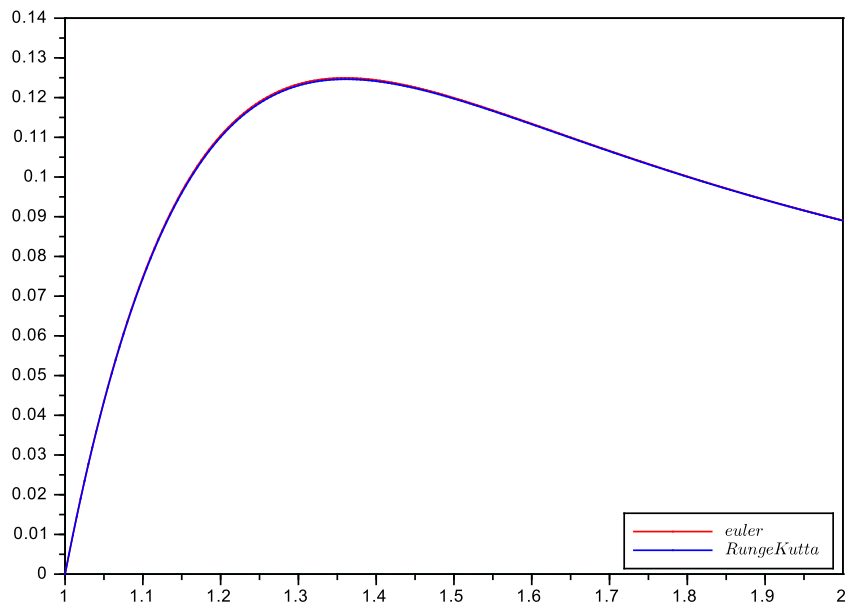
$k_4 = f(t_n + h, y_n + hk_3)$

, η προσαύξηση που εξαρτάται από την κλίση στο τέλος του διαστήματος.

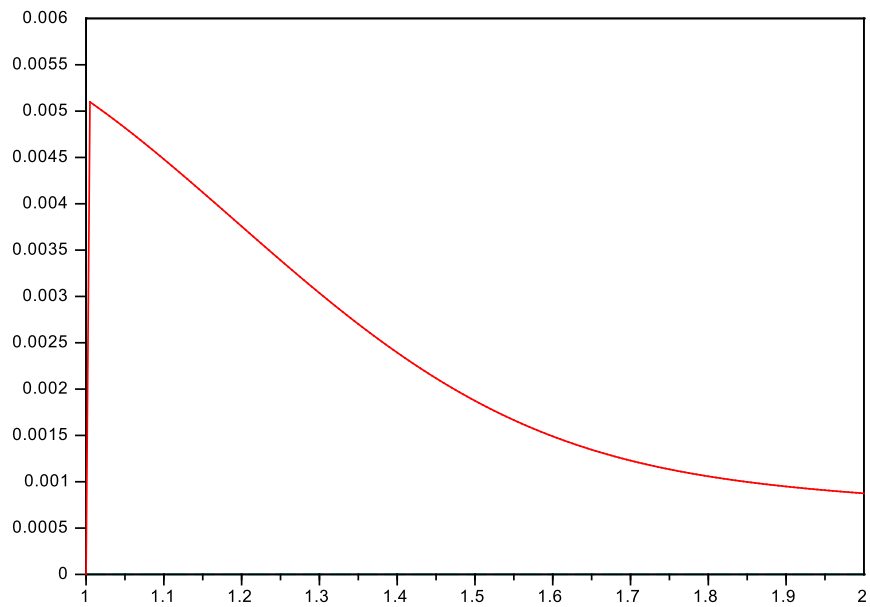
Υπολογίζοντας το σταθμισμένο μέσο ορο των παραπάνω, καταλήγουμε στην (1). Η Runge Kutta είναι μέθοδος 4ης τάξης, γιατί το συνολικό σφάλμα είναι h^4 .

5.3 Σύγκριση Μεθόδων

Το πρόγραμμα eulerrk.sci δίνει τα επόμενα διαγράμματα:



Σχήμα 14: Μέθοδοι Euler και Runge Kutta 4ης τάξης



Σχήμα 15: Το σχετικό σφάλμα της Euler ως προς την Runge Kutta

Η διαφορική εξίσωση που δόθηκε δεν έχει αναλυτική λύση, επομένως συγκρίναμε τις 2 μεθόδους μεταξύ τους. Το απόλυτο σφάλμα μεταξύ των 2 είναι της τάξης του 10^{-4} , ενώ κάποια απόκλιση παρατηρείται στην καμπύλη της λύσης στο διάστημα [1.3,1.4]. Με μεγαλύτερο βήμα, θα βλέπαμε μεγαλύτερη διαφορά. Επίσης, το σφάλμα έχει αυτή τη μορφή, επειδή συγκρίνουμε τις 2 μεθόδους μεταξύ τους αντί με την ακριβή λύση.

6 Επίλυση Γραμμικού Συστήματος Εξισώσεων

Στο τελευταίο θέμα λύνουμε ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων $\vec{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ με απαλοιφή Gauss, μέθοδο Gauss-Seidel και με τη βοήθεια τριδιαγώνιου πίνακα.

6.1 Μέθοδος Gauss

Η απαλοιφή Gauss μετατρέπει τον πίνακα των συντελεστών A σε τριγωνικό, με τη λεγόμενη "εμπρός αντικατάσταση" (forward elimination) και στη συνέχεια επιλύεται με "προς τα πίσω αντικατάσταση" (backward elimination).

Ξεκινάμε πολλαπλασιάζοντας την πρώτη γραμμή του πίνακα με κατάλληλο αριθμό και την προσθέτουμε στις επόμενες, ώστε να απαλοιφεί ο πρώτος συντελεστής a_{11} . Ακολουθούμε την ίδια διαδικασία και για τις επόμενες γραμμές, μέχρις ότου ο πίνακας γίνει τριγωνικός. Τότε, ξεκινώντας από τον τελευταίο όρο, εφαρμόζουμε "πίσω αντικατάσταση" (back substitution), υπολογίζοντας τα στοιχεία του διανύσματος $\vec{x}, x_{n,1}, x_{n-1,1} \dots x_{1,1}$.

Στο πρόγραμμα gauss.sci εισάγουμε τον πίνακα συντελεστών A και το διάνυσμα στήλη b και τυπώνει το διάνυσμα \vec{x} . Για το σύστημα της εργασίας, βρίσκουμε

\vec{x}
- 1.622729536
- 2.364182318
1.542687628
3.373654535

Στην "εμπρός αντικατάσταση" το πρόγραμμα επιλέγει το συντελεστή της στήλης με τη μεγαλύτερη απόλυτη τιμή και εναλλάσσει τις γραμμές, ώστε να αποφύγουμε διαίρεση με το μηδέν ή με αριθμό μικρότερο της ακρίβειας eps, εισάγοντας τότε μεγάλα σφάλματα στο υπολογισμό.

6.2 Μέθοδος Gauss-Seidel

Η μέθοδος Gauss Seidel είναι επαναληπτική μέθοδος που χρησιμοποιεί μια αρχική πρόβλεψη του διανύσματος \vec{x} , και λύνοντας σε σειρά κάθε μία από τις εξισώσεις, προσεγγίζει σε κάθε επανάληψη μία λύση.

$$b_i - \sum_{j<i} a_{ij} \cdot x_j - \sum_{j>i} a_{ij} \cdot x_j$$

Ο αλγόριθμος που εφαρμόζει είναι $x_i = \frac{b_i - \sum_{j<i} a_{ij} \cdot x_j - \sum_{j>i} a_{ij} \cdot x_j}{a_{ii}}$.

Η Gauss Seidel μπορεί να εφαρμοστεί σε οποιοδήποτε πίνακα με μη μηδενικά διαγώνια στοιχεία, όμως η σύγκλιση είναι δεδομένη, όταν ο πίνακας συντελεστών είναι "diagonally dominant" ή συμμετρικός και θετικά ορισμένος. Στην περίπτωσή μας όμως, ο πίνακας A δεν έχει αυτές τις ιδιότητες, αρα δεν μπορούμε να εγγυηθούμε σύγκλιση.

Εισάγουμε στο πρόγραμμα gaussseidel.sci τον πίνακα A, το διάνυσμα b, το μέγιστο αριθμό επαναλήψεων N=100 και επιθυμητή ακρίβεια 10^{-4} και το αποτέλεσμα είναι:

\vec{x}
- 1.622730847
- 2.364190222
1.54270854
3.373664614

μετά από 13 επαναλήψεις. Αν μειώσουμε την ακρίβεια, τότε χρειαζόμαστε λιγότερες επαναλήψεις. Όπως βλέπουμε τα αποτελέσματα συμφωνούν με τη μέθοδο Gauss μέχρι και το 4ο δεκαδικό ψηφίο, όπως ορίσαμε δηλαδή την επιθυμητή ακρίβεια.

6.3 Μέθοδος με τριδιαγώνιο πίνακα

Στη μέθοδο αυτή ο πίνακας του συστήματος γράφεται ως γινόμενο ενός κάτω τριγωνικού (L) και ενός άνω τριγωνικού (U) πίνακα, με παραγοντοποίηση LU. Έτσι, η επίλυση του $\vec{A} \cdot \vec{x} = \vec{b}$ ανάγεται στην επίλυση

των $\vec{L}\vec{z} = \vec{b}$ και $\vec{U} \cdot \vec{x} = \vec{z}$, όπου εφαρμόζουμε μπρος και πίσω αντικατάσταση, αντίστοιχα.

Το πρόγραμμα ludecomposition.sci εφαρμόζει την παραγοντοποίηση LU και στη συνέχεια τρέχουμε το πρόγραμμα Lbforward.sci δίνοντας στην είσοδο τα διανύσματα \vec{L} και \vec{b} . Η έξοδος \vec{z} εισάγεται με τον πίνακα U στο πρόγραμμα Uzbackward.sci, δίνοντας το διάνυσμα \vec{x} . Τα αποτελέσματα συμφωνούν με αυτά της μεθόδου Gauss.

Στην προκειμένη περίπτωση, δεν προβλέπεται εναλλαγή σειρών για αποφυγή διαίρεσης με το μηδέν ή με ένα πολύ μικρό αριθμό. Παρόλα αυτά, ο κώδικας θα μπορούσε να αντικατασταθεί με την αντίστοιχη διαδικασία της απαλοιφής Gauss.

\vec{x}
- 1.622729536
- 2.364182318
1.542687628
3.373654535