Sammanfattning av SF1544 Numeriska metoder, grundkurs

Yashar Honarmandi
yasharh@kth.se

26 februari 2019

Sammanfattning

Detta är en sammanfattning av SF1544 Numeriska metoder, grundkurs.

Innehåll

1 Användbar matte

Allmän begränsning av globalt fel Betrakta begynnelsevärdesproblemet

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}(t) &= f(t, y(t)),\\ y(a) &= b,\end{aligned}$$

löst på $[a, T]$, där f är Lipschitzkontinuerlig. Betrakta en numerisk lösning med lokalt fel begränsad av Mh^{p+1}. Då begränsas det globala felet av

$$|y(T) - y_N| \leq \frac{e^{L(T-a)}M}{L}h^p.$$

Bevis Vi inför $y(t; t_n)$ som den exakta lösningen som startar i (t_n, y_n). Det globala felet ges då av

$$\begin{aligned}|y(T) - y_N| &= |y(T) - y(T; t_{N-1}) + y(T; t_{N-1}) + \cdots - y(T; t_1) + y(T; t_1) - y_N|\\ &\leq |y(T) - y(T; t_{N-1})| + |y(T; t_{N-1}) - y(T; t_{N-2})| + \cdots + |y(T; t_1) - y_N|.\end{aligned}$$

Den första termen ges simpelthen av det lokala felet. Satsen om entydighet av lösning för en sådan differentialekvation ger vidare

$$|y(T; t_i) - y(T; t_{i-1})| \leq e^{L(T-t_i)}|y(t_i; t_i) - y(t_i; t_{i-1})|.$$

Det som står kvar i absolutbeloppstecknet är det lokala felet, eftersom den vänstra termen är exakt och den högra kommer från en iteration. Detta ger

$$|y(T; t_i) - y(T; t_{i-1})| \leq e^{L(T-t_i)}Mh^{p+1} = e^{L(N-i)h}Mh^{p+1}$$

och vidare

$$\begin{aligned}|y_N - y(T)| &\leq Mh^{p+1} + Mh^{p+1}e^{Lh} + \cdots + Mh^{p+1}e^{L(N-1)h}.\\ &= Mh^{p+1}\frac{1 - e^{LNh}}{1 - e^{Lh}}\\ &= Mh^{p+1}\frac{e^{LNh} - 1}{e^{Lh} - 1}\\ &\leq Mh^{p+1}\frac{e^{LNh}}{Lh},\end{aligned}$$

och beviset är klart.

Möjlighet för polynominterpolation Givet $n + 1$ punkter (x_i, y_i), där $x_i \neq x_j$ om $i \neq j$, finns det ett entydigt polynom p av grad (högst) n så att $p(x_i) = y_i \ \forall i = 1, \ldots, n + 1$.

Bevis För att visa existensen av p, kan vi välja det som

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n+1} y_i \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Denna metoden kallas för Lagrangeinterpolation. Vi ser att p har grad n och

$$p(x_k) = \sum_{i=1}^{n+1} y_i \prod_{j \neq i} \frac{x_k - x_j}{x_i - x_j}.$$

För alla termer i summan där $i \neq k$ kommer det finnas en faktor $x_k - x_k$ i nämnaren, och dessa ger inget bidrag. För $i = k$ blir produkten bara 1, och $p(x_k) = y_k$.

För att visa att p är entydig, antag att q är ett annat interpolationspolynom och bilda $v = q - p$, med grad högst n. Detta ger att v har $n + 1$ nollställen. Detta är endast möjligt om $v = 0$, och därmed måste p vara unikt.

Fel för linjär interpolation Antag att $f \in C^2$. Låt p vara det linjära polynomet som interpolerar punkterna $(x_0, f(x_0))$ och $(x_0 + h, f(x_0 + h))$. Då gäller $|f(x) - p(x)| \leq Ch^2,\ x_0 \leq x \leq x_0 + h$, där

$$C = \max_{x_0 \leq z \leq x_0 + h} \frac{\left| \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(z) \right|}{8}.$$

Bevis Antag $x_0 = 0$, och bilda $g = f - p$. g är kontinuerlig på $[0, h]$, och antar därmed ett största och minsta värde på detta intervallet. Antag att den antar sitt största värde i $x = a$. Taylorutveckling kring a ger

$$g(x) = g(a) + \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}(a)(x - a) + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}x^2}(c)(x - a)^2$$

för något $c \in [a, x]$. Vi ser att andra termen måste bli 0, ty a är en maxpunkt. Evaluering av Taylorutvecklingen i $x = 0$ eller $x = h$ (den som är närmast a) ger $g(x) = 0$ och

$$\begin{aligned} g(a) &= -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}x^2}(c)(x - a)^2, \\ |g(a)| &\leq \frac{1}{2} \max_{x_0 \leq z \leq x_0 + h} \left| \frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}x^2}(z) \right| \left(\frac{1}{2} h \right)^2. \end{aligned}$$

Vi vet att $\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(x) = \frac{\mathrm{d}^2 g}{\mathrm{d}x^2}(x)$ eftersom p är linjär, vilket ger

$$|g(a)| \leq \max_{x_0 \leq z \leq x_0 + h} \frac{\left| \frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(z) \right|}{8} h^2.$$

Konvergens för potensmetoden Antag för en given matris A att dens egenvärden uppfyller $|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq \cdots \geq |\lambda_n|$ och att dens egenvektorer $v_1, \ldots, v_n$ spänner upp R^n. Då konvergerar potensmetoden för nästan alla startvektorer x^0 till egenvektorn v_1 och egenvärdet λ_1, med maximal konvergensrate $\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$.

Bevis Vi kan skriva

$$x^0 = \sum_{i=1}^{n} c_i v_i.$$

Om $c_1 \neq 0$ ger k multiplikationer med A

$$A^k x^0 = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^k c_i v_i.$$

Potensmetoden ger oss nu

$$x^{k+1} = \frac{1}{\left\| \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^k c_i v_i \right\|} \sum_{i=1}^{n} \lambda_i^k c_i v_i.$$

Om vi antar att både c_1 och λ_1 är positiva, kan detta skrivas som

$$x^{k+1} = \frac{1}{\left\| \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k \frac{c_i}{c_1} v_i \right\|} \sum_{i=1}^{n} \left(\frac{\lambda_i}{\lambda_1}\right)^k \frac{c_i}{c_1} v_i.$$

Om λ_1 är negativ, kan man dividera med dens belopp. Om c_1 är negativ, får du fortfarande konvergens mot en egenvektor motsvarande egenvärdet λ_1.

Enligt antagandet kommer iterationen för stora k att konvergera mot $\frac{v_1}{\|v_1\|}$. Vi noterar även att enligt antagandet är det termen motsvarande $i = 2$ som konvergerar långsammast, och att konvergensen sker med en faktor $\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|$.

2 Grundläggande koncept för numeriska metoder

Lokal konvergens En numerisk metod säjs vara lokalt konvergent om den konvergerar mot ett givet numeriskt värde för startgissningar som är tillräckligt nära det rätta värdet.

Linjär konvergens En numerisk metod vars feltermer uppfyller

$$\lim_{n \to \infty} \frac{e_{n+1}}{e_n} = S$$

är linjärt konvergent med hastighet S.

Kvadratisk konvergens En numerisk metod vars feltermer uppfyller

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

är kvadratiskt konvergent.

Noggrannhetsordning Om u_h är en approximation av en storhet u, där h är positionsparametern, och det finns tall p, C och h_0 sådana att

$$|u_h - u| \leq Ch^p, h \leq h_0,$$

sägs approximationen ha noggrannhetsordning p.

Absolut och relativt fel Låt $\tilde{x}$ vara ett approximativt värde av storheten x. Då definieras det absoluta felet som

$$e_x = \tilde{x} - x$$

och det relativa felet som

$$r_x = \frac{e_x}{x}.$$

Felgränser Felgränserna definieras som

$$|e_x| \leq E_x, |r_x| \leq R_x.$$

Felförplantning Låt $y = f(x)$ och $\tilde{y} = f(\tilde{x})$ vara en approximation av y. Detta ger

$$\begin{aligned} e_y &= \tilde{y} - y \\ &= f(\tilde{x}) - f(x) \\ &\approx f(\tilde{x}) - \left(f(\tilde{x}) + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\tilde{x})(x - \tilde{x}) \right) \\ &= -\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\tilde{x})(x - \tilde{x})) \\ &= \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\tilde{x})e_x, \end{aligned}$$

och felgränsen ges av

$$E_y \approx \left| \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\tilde{x}) \right| E_x.$$

Den motsvarande relationen i högre dimensioner är

$$E_y \approx \sum \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(\tilde{\mathbf{x}}) \right| E_{x_i}.$$

Om vi nu utgår från ett approximativt värde $\tilde{y} = f(\tilde{\mathbf{x}})$ och approximerar de partiella derivatorna, till exempel genom mätningar, med

$$\frac{\partial f}{\partial x_i}(\tilde{\mathbf{x}}) = \frac{f(\tilde{\mathbf{x}} + E_{x_i}\mathbf{e}_{x_i}) - f(\tilde{\mathbf{x}})}{E_{x_i}},$$

kan man definiera

$$\tilde{y}_i = f(\tilde{\mathbf{x}} + E_{x_i}\mathbf{e}_{x_i})$$

och få

$$E_y \approx \sum |\tilde{y}_i - \tilde{y}|.$$

Kancellation Om man på en dator subtraherar två nästan lika stora tal, förlorar man precision. Det suger.

Utskiftning Om man på en dator adderar två tal som är mycket olika stora, kan datorn ignorera information från den minre siffran.

Konditionstal Konditionstalet definieras som

$$\kappa = \lim_{\delta \to 0} \max_{|e_x| \leq \delta} \frac{\left|\frac{e_y}{y}\right|}{\left|\frac{e_x}{x}\right|}.$$

3 Lösning av ekvationer

Fixpunktsmetoden Betrakta ekvationen

$$x = g(x).$$

Fixpunktsmetoden är en enkel iterationsmetod för att lösa denna ekvationen, med den enkla iterationsformeln

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

En pseudokod-beskrivning av en lösning med startvillkor `x0` där det itereras tills lösningen stämmer med en tolerans `t` är:

```
define g(x)
input x0
input t
while abs(x - g(x)) > t
        x = g(x)
end
return x
```

Konvergens Om $g \in C^1$, $\left|\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}(\alpha)\right| < 1$ och α är en fixpunkt. finns det en omgivning till α så att om x_0 är i denna omgivningen, går $x_n \to \alpha$. Metoden konvergerar linjärt med reduktionsfaktor $S = \left|\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}(\alpha)\right|$.

För att visa detta, skriver vi

$$x_{n+1} - \alpha = g(x_n) - g(\alpha) = \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}(c)(x_n - \alpha),$$

där vi har använt medelvärdesatsen och det faktum att α är en fixpunkt. Vidare, eftersom $g \in C^1$ finns det en omgivning till α så att $\left|\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}(x)\right| \leq \frac{S+1}{2}$, dvs. ett tal som är mindre än 1, men större än S. Om x_0 är i denna omgivningen, är

$$e_{n+1} \leq \frac{S+1}{2} e_n.$$

Detta implicerar att $x_n \to \alpha$ och att

$$\frac{e_{n+1}}{e_n} \to S.$$

Fixpunktsmetoden för system Betrakta ekvationssystemet

$$\mathbf{x} = \mathbf{g}(\mathbf{x}).$$

Vi löser även detta med fixpunktsmetoden, och använder iterationsformeln

$$\mathbf{x}_{n+1} = g(\mathbf{x}_n).$$

En pseudokod-beskrivning av en lösning med startvillkor `x0` där det itereras tills lösningen stämmer med en tolerans `t` är:

```
define g(x)
input x0
input t
while abs(x - g(x)) > t
        x = g(x)
end
return x
```

där allt nu är listor. Toleransen ser kanske lite annorlunda ut, vafan vet jag.

Intervallhalveringsalgoritmen Betrakta ekvationen

$$f(x) = 0.$$

Intervallhalveringsalgoritmen utgår från två punkter a, b så att $f(a)f(b) < 0$, och gör följande:

1. Beräkna funktionsvärdet i punkten $m = \frac{b+a}{2}$.
2. Om $f(a)f(m) < 0$, sätt $a = m$. Annars, sätt $b = m$.
3. Sluta iterationen när intervallbredden $\frac{b-a}{2}$ är mindre än den givna toleransen.
4. Returnera $\frac{b+a}{2}$.

En pseudokod-beskrivning av en lösning med startvillkor `a` och `a` där det itereras tills lösningen stämmer med en tolerans `t` är:

```
define f(x)
input a, b
input t
while (b - a)/2 > t
        m = (a + b)/2
        if f(a)f(m) < 0
                a = m
        else
                b = m
        end
end
return (a + b)/2
```

Newton-Rhapsonsmetoden Betrakta ekvationen

$$f(x) = 0.$$

Newton-Rhapsons metod utgår från tangenten till f. Om man startar i x_0, har tangenten ekvation $t(x) = \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_0)(x - x_0) + f(x_0)$. Dens nollställe ges av

$$x = x_0 - \frac{f(x_0)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_0)}.$$

Från detta gör vi iterationen

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)}$$

som avslutas när $|x_{n+1} - x_n|$ är mindre än någon tolerans. Vi ser att detta är en variant av fixpunktsmetoden med $g(x) = x - \frac{f(x)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)}$.

En pseudokod-beskrivning av en lösning med startvillkor `x_0` där det itereras tills lösningen stämmer med en tolerans `t` är:

```
define f(x)
define fderiv(x)
input x_0
input t
while f(x_0) > t
        x = x - f(x)/fderiv(x)
end
return x
```

Konvergens Om $f \in C^2$ och $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\alpha) \neq 0$, är Netwon-Rhapsons metod kvadratiskt konvergent med konstant $M = \frac{\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(\alpha)}{2\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\alpha)}$.

För att visa detta, notera först att om α är ett nollställe till f, är det även ett nollställe till $\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}$, ty för $f \in C^2$ och $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\alpha) \neq 0$ gäller att

$$\frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}x}(\alpha) = 1 - \frac{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\alpha)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\alpha)} + \frac{f(\alpha)\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(\alpha)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(\alpha)^2} = 0.$$

Därmed följer lokal konvergens följer av beviset som gjordes för fixpunktsmetoden. Vi Taylorutvecklar vidare f nära x_n och får

$$f(\alpha) = f(x_n) + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)(\alpha - x_n) + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(c_n)(\alpha - x_n)^2,$$
$$\frac{f(\alpha)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)} = \frac{f(x_n)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)} + \alpha - x_n + \frac{1}{2}\frac{\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(c_n)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)}(\alpha - x_n)^2 = 0,$$

under antagandet $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n) \neq 0$. Eftersom α är ett nollställe till f, skriver vi om detta till

$$x_n - \frac{f(x_n)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)} - \alpha = \frac{1}{2}\frac{\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(c_n)}{\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)}(\alpha - x_n)^2.$$

Vi känner igen de två första termerna på vänstersidan som x_{n+1}, och detta implicerar därmed

$$\frac{e_{n+1}}{e_n^2} = \left|\frac{\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(c_n)}{2\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_n)}\right| \to M,$$

och beviset är klart.

Newton-Rhapsons metod för system Betrakta ekvationen

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = 0.$$

Metoden är den samma för ett enda system. Den utgår från den linjära approximationen

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x}_0) + \mathrm{d}\mathbf{f}\,(\mathbf{x}_0)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$$

och ger iterationen

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathrm{d}\mathbf{f}\,(\mathbf{x}_n)^{-1} f(\mathbf{x}_n).$$

Notera att beräkningsmässigt är det svårt att hitta en inversmatris, så det är smartare att hitta en vektor $\mathbf{h}$ så att $\mathrm{d}\mathbf{f}\,(x_n)\mathbf{h} = \mathbf{f}(x_n)$ och använda den i stället.

Linjära system Lösning av ett $n \times n$ linjärt system $Ax = b$ görs med ett antal beräkningar som är $O\,(n^p)$ för något p. För Gausselimination är $p = 3$.

Störningsanalys Antag att man försöker lösa ett system $Ax = b$. Givet approximativ indata $\tilde{b}$ med en given felgräns, dvs. en given gräns för $\left|b - \tilde{b}\right|$, hur stor felgräns fås för den approximativa lösningen $\tilde{x}$?

Man kan skriva

$$|x - \tilde{x}| = A^{-1}\left|b - \tilde{b}\right|,$$

och normen av detta blir

$$\|x - \tilde{x}\| \leq \left\|A^{-1}\right\|\left\|b - \tilde{b}\right\|,$$

där vi har infört matrisnormen

$$\|A\| = \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|}{\|x\|}$$

som uppfyller

$$\|Ax\| \leq \|A\|\|x\|.$$

Uttrycket ovan innehåller absoluta fel, men ofta vet vi bara relativa fel på formen $\frac{\|b - \tilde{b}\|}{\|b\|}$. Med hjälp av matrisnormen kan vi dock skriva

$$\|b\| \leq \|A\|\|x\|,$$

vilket kan kombineras med uttrycket ovan för att ge

$$\frac{\|x - \tilde{x}\|}{\|x\|} \leq \left\|A^{-1}\right\|\|A\|\frac{\left\|b - \tilde{b}\right\|}{\|b\|}.$$

Vi kan då definiera konditionstalet $\kappa = \left\|A^{-1}\right\|\|A\|$, vilket ger

$$R_x \leq \kappa R_b.$$

4 Interpolation

Det fundamentala interpolationsproblemet går ut på att hitta en kurva som bäst möjligt passar med vissa datapunkter. Kom i håg satsen om möjlighet för polynominterpolation.

Polynominterpolation - första försök Vi gör först en naiv ansats

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i x^i$$

och anpassar konstanterna så att p antar rätt värden i datapunkterna. Detta ger oss ett linjärt system

$$X\mathbf{c} = \mathbf{y},$$

där $\mathbf{c}$ är en vektor med alla koefficienter, $\mathbf{y}$ är en vektor med alla y-värden och $X_{ij} = x_j^{i-1}$. X kallas för en Vandermonde-matris. Om man har många datapunkter, kan detta dock ge upphov till ett illakonditionerad system.

Lagrangeinterpolation Som vi så innan är ett möjligt interpolationspolynom

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n+1} y_i \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Newtons interpolationsmetod Vi gör en ny ansats

$$\begin{aligned} p(x) &= d_0 + d_1(x - x_0) + d_2(x - x_0)(x - x_1) + \dots \\ &= \sum_{i=0}^{n} d_i \prod_{j<i} (x - x_j). \end{aligned}$$

Vi ser att $p(x_0) = y_0$, och man kan från detta få de nästa koefficienterna.

Minsta kvadratmetoden Minsta kvadratmetoden är en metod för approximation av överbestämda ekvationssystem, dvs. system med fler ekvationer än obekanta. Sådana system har inget interpolationspolynom.

Sådana ekvationssystem kan formuleras som $A\mathbf{x} = \mathbf{b}$. Minsta kvadratlösningen är den lösningen som minimerar $\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|$. Mer specifikt, om vi söker en funktion $f(x) = \sum_{i=1}^{n} c_i \phi i(x)$, där funktionerna ϕ_i kan väljas som vi vill, är $A_{ij} = \phi j(x_i)$, $\mathbf{x}_i = c_i$ och $\mathbf{b}_i = y_i$.

Minstakvadratlösningen till detta systemet löser normalekvationerna

$$A^T A\mathbf{x} = A^T\mathbf{b}.$$

Om kolumnerna i A är linjärt oberoende, har detta en lösning.

5 Optimering

Denna delen kommer handla om att försöka hitta minima till en funktion över ett rum. Att hitta maxpunkter är det samma som att byta tecken och hitta minimun, så vi fokuserar därför på att hitta minima.

Gyllene snitt-sökning Antag att f är kontinuerlig och har endast ett lokalt minimum på $[a, b]$, och betrakta två punkter x_1 och x_2. Om $f(x_1) \leq f(x_2)$ finns minimumspunkten på $[a, x_2]$, och om $f(x_1) \geq f(x_2)$ finns minimumspunkten på $[x_1, b]$. Detta gäller eftersom derivatan endast byter tecken en gång på $[a, b]$, och vi med hjälp av funktionsvärdena i två punkter får information om derivatan imellan dessa punkterna. Man kan få en ganska säker metod vid att välja både x_1 och x_2 nära mitten av intervallet.

Metoden kan förbättras vid att återanvända funktionsvärden i kommande interationer. Sätt $a = 0, b = 1$. Vi väljer x_1 och x_2 symmetriskt och likformigt, så att $x_2 = 1 - x_1$ och

$$\frac{x_1}{x_2} = \frac{x_2}{1}.$$

Vi kan lösa detta och få

$$x_1 = \frac{3 \pm \sqrt{5}}{2}, \; x_2 = \frac{\sqrt{5} - 1}{2}.$$

Vi ser att x_2 är det gyllene snitt. Med detta val gäller att intervallängden avtar med en faktor g per iteration.

Newtons metod Newtons metod för att hitta minima till en funktion $f(\mathbf{x})$ är att använda Newtons metod för att lösa ekvationssystemet $\vec{\boldsymbol{\nabla}} f(\mathbf{x}) = \mathbf{0}$.

Gradientmetoden Vi vet att f avtar snabbast i riktningen $-\vec{\boldsymbol{\nabla}} f(\mathbf{x})$. Vi gör därför iterationen

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \gamma_n \vec{\boldsymbol{\nabla}} f(\mathbf{x}_n).$$

γ_n kan väljas konstant eller så att den minimerar $f(\mathbf{x}_{n+1})$. Jämförd med Newtons

6 Derivator

Framåtdifferens En derivata kan approximeras med framåtdifferensen

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

Fel För att få en skattning av felet, använder vi Taylorutveckling för att få

$$f(x+h) - f(x) \approx \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)h + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(c)h^2,$$

och

$$\frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x) = \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(c)h.$$

Val av steglängd Antag att vi approximerar f med $\tilde{f}$, där $\tilde{f}$ uppfyller $\left|\tilde{f}(x) - f(x)\right| \leq \varepsilon \ \forall x$. Felet vi gör i skattning av derivatan ges då av

$$\begin{aligned}\left|\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x) - \frac{\tilde{f}(x+h) - \tilde{f}(x)}{h}\right| \leq & \left|\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h}\right| \\ & + \left|\frac{\tilde{f}(x+h) - f(x+h) - \tilde{f}(x) + f(x)}{h}\right| \\ \leq & Ch + \frac{2\varepsilon}{h}.\end{aligned}$$

Detta felet har sitt minimum för $h = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{C}}$.

Central differens Man kan alternativt försöka med en central differens

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Fel Vi Taylorutvecklar igen och får

$$\begin{aligned}f(x+h) &\approx f(x) + \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)h + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(x)h^2 + \frac{1}{6}\frac{\mathrm{d}^3 f}{\mathrm{d}x^3}(c_1)h^3, \\ f(x-h) &\approx f(x) - \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x)h + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(x)h^2 - \frac{1}{6}\frac{\mathrm{d}^3 f}{\mathrm{d}x^3}(c_2)h^3.\end{aligned}$$

Då blir centrala differensen

$$\begin{aligned}\frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h} - \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x) &\approx \frac{1}{12}h^2\left(\frac{\mathrm{d}^3 f}{\mathrm{d}x^3}(c_1) + \frac{\mathrm{d}^3 f}{\mathrm{d}x^3}(c_2)\right) \\ &\approx \frac{1}{6}\frac{\mathrm{d}^3 f}{\mathrm{d}x^3}(c)h^2,\end{aligned}$$

där vi i sista raden har använt medelvärdesatsen.

Val av steglängd Antag att vi approximerar f med $\tilde{f}$, där $\tilde{f}$ uppfyller $\left|\tilde{f}(x) - f(x)\right| \leq \varepsilon \ \forall x$. Felet vi gör i skattning av derivatan minimeras då för $h \propto \sqrt[3]{\varepsilon}$.

7 Integration

Eulers metod Antag att vi vill integrera en funktion f över $[a, b]$. En enkel metod är att dela upp $[a, b]$ i N steg, låta $x_0 = a, x_N = b$. Eulers metod ger

$$\begin{aligned} y_N &= y_{N-1} + hf(x_{N-1}) \\ &= y_{N-2} + hf(x_{N-2}) + hf(x_{N-1}) \\ &\vdots \\ &= y_0 + h\sum_{i=0}^{N-1} f(x_i). \end{aligned}$$

Vi får slutligen approximationen

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx h\sum_{i=0}^{N-1} f(x_i).$$

Fel Utgå från differentialekvationen

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f, y(a) = y_0,$$

och antag att vi vill integrera f över $[a, b]$. Analysens huvudsats ger

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = y(b) - y(a).$$

Att beräkna denna integralen är alltså helt ekvivalent med Eulers metod. Vi försöker därför först att hitta det lokala felet på $[x_i, x_{i+1}]$, som enligt argumentet från Eulers metod ges av

$$|y_{i+1} - y(x_{i+1})| \leq \frac{1}{2}\left|\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}t^2}(c)\right| h^2,$$

där $c \in [x_i, x_{i+1}]$. Enligt sats ges det globala felet då av

$$|y_N - y(x_N)| \leq \frac{e^{L(a-b)}}{2L} \max_{c\in[a,b]} \left|\frac{\mathrm{d}^2 y}{\mathrm{d}t^2}(c)\right| h,$$

där vi har ändrat derivatan för att vara säker på att den anger en övre begränsning av det lokala felet. Detta kan skrivas om till

$$|y_N - y(x_N)| \leq \frac{e^{L(a-b)}}{2L} \max_{c\in[a,b]} \left|\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}(c)\right| h.$$

Trapetsmetoden Betrakta integralen av en funktion f över $[a, b]$. Dela nu upp $[a, b]$ i N steg, och låt $x_0 = a, x_N = b$. I trapetsmetoden interpolerar vi f i x_i och x_{i+1} och integrerar denna räta linjen. Integralen är lika med arean av en trapets, vilket vi enkelt kan beräkna. En approximation av integralen över $[x_i, x_{i+1}]$ är därmed

$$h\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2}.$$

En approximation av hela integralen är då

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x &\approx h\sum_{i=0}^{N-1}\frac{f(x_{i+1}) + f(x_i)}{2} \\ &= h\left(\frac{f(x_0) + f(x_N)}{2} + \sum_{i=1}^{N-1} f(x_i)\right).\end{aligned}$$

Fel Låt T_h vara skattningsfelet av integralen med trapetsmetoden med steglängd h. Felet ges då av

$$\left|\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - T_h\right| \leq \max_{x\in[a,b]}\frac{1}{12}\left|\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}(x)\right|(b-a)h^2.$$

För att visa detta, notera att det är ekvivalent att beräkna integralen av f och att lösa begynnelsevärdesproblemet

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}x} = f(x),\ y(a) = y_0.$$

Vi har en sats som beskriver det globala felet, och därmed behöver vi bara beräkna det lokala felet för integration mellan två punkter.

Simpsons metod Använder kvadratisk interpolation.

Fel Låt S_h vara skattningsfelet av integralen med Simpsons metod med steglängd h. Felet ges då av

$$\left|\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x - S_h\right| \leq \max_{x\in[a,b]}\frac{1}{80}\left|\frac{\mathrm{d}^4 f}{\mathrm{d}x^4}(x)\right|(b-a)h^4.$$

Monte Carlo-integration Medelvärdesatsen för integraler ger att

$$\frac{1}{b-a}\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = f(c),$$

där $f(c)$ är funktionens medelvärde på $[a, b]$. Vi kan skatta medelvärdet som

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1} N f(x_i),$$

där alla x_i är dragna oberoende från en likformig fördelning på $[a, b]$. Detta kallas för Monte Carlo-integration.

Metoden är helt analog i högre dimensioner.

Fel Om vi antar att alla x_i dras från en likformig sannolikhetstäthet, kan vi skriva

$$\frac{1}{b-a} \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b f(x)p(x)\,\mathrm{d}x\,,$$

där p är sannolikhetstätheten. Vänstersidan kan även skrivas som $\mathrm{E}\left(f(X)\right)$.

Vi inför den stokastiska variabeln

$$\varepsilon_n = \frac{1}{N} \sum_{i=1} N f(X_i) - \mathrm{E}\left(f(X)\right).$$

Dens väntevärde ges av

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\left(\varepsilon_n\right) &= \frac{1}{N} \sum_{i=1} N \mathrm{E}\left(f(X_i)\right) - \mathrm{E}\left(f(X)\right) \\
&= \mathrm{E}\left(f(X)\right) - \mathrm{E}\left(f(X)\right) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

Vi har vidare

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\left(\varepsilon_n^2\right) &= \mathrm{E}\left(\left(\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} f(X_i) - \mathrm{E}\left(f(X)\right)\right)^2\right) \\
&= \frac{1}{N^2}\mathrm{E}\left(\left(\sum_{i=1}^{N}(f(X_i) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))\right)^2\right) \\
&= \frac{1}{N^2}\mathrm{E}\left(\left(\sum_{i=1}^{N}(f(X_i) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))\right)^2\right) \\
&= \frac{1}{N^2}\mathrm{E}\left(\left(\sum_{i=1}^{N}(f(X_i) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))\right)^2\right) \\
&= \frac{1}{N^2}\mathrm{E}\left(\sum_{i=1}^{N}(f(X_i) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))^2 + \sum_{n\neq m}(f(X_n) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))(f(X_m) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))\right) \\
&= \frac{1}{N^2}\sum_{i=1}^{N}\mathrm{E}\left((f(X_i) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))^2\right) + \mathrm{E}\left(\sum_{n\neq m}(f(X_n) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))(f(X_m) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))\right) \\
&= \frac{\sigma_f^2}{N} + 0.
\end{aligned}$$

Korstermerna har väntevärde

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\left((f(X_n) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))(f(X_m) - \mathrm{E}\left(f(X)\right))\right) &= \mathrm{E}\left(f(X_n) - \mathrm{E}\left(f(X)\right)\right)\mathrm{E}\left(f(X_m) - \mathrm{E}\left(f(X)\right)\right) \\
&= 0,
\end{aligned}$$

då de olika X_i är oberoende. Därmed är standardavvikelsen av ε_N lika med $\frac{\sigma}{\sqrt{N}}$, och felet i metoden är proportionellt mot $\frac{1}{\sqrt{N}}$.

Vi noterar att centrala gränsvärdesatsen ger att $\nu = \frac{\sqrt{N}}{\sigma}\varepsilon_N$ är standard normalfördelat.

I d dimensioner är felet proportionellt mot $N^{-\frac{d}{2}}$, och vi ser att den är bättre än trapetsmetoden för $d > 4$.

8 Lösning av ordinarie differentialekvationer

Eulers metod (framåt) Betrakta begynnelsevärdesproblemet

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}(t) &= f(t, y(t)), \\
y(a) &= b.
\end{aligned}$$

Eulers metod går ut på att

1. Dela upp intervallet vi vill lösa problemet på i diskreta steg, där steg n finns i punkten $t_n = a + nh$, där h är steglängden.

2. Linjarisera problemet till

$$y_{n+1} - y_n = f(t_n, y_n)h,$$

där $y_n = y(t_n)$.

En pseudokod-beskrivning av en lösning med startvillkor `t0` och `y0`, steglängd `h` och `N` steg är:

```
define f(t, y)
input t0 and y0
input h and N
t = t0
y = y0
for 1 < i < N
        y = y + f(t, y)*h
        t = t + h
end
```

Felanalys Om vi betraktar det första steget i iterationen, har man lokalt

$$\begin{aligned} y(t_1) &= y(t_0) + \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}(t_0)(t_1 - t_0) + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}t^2}(\alpha)(t_1 - t_0)^2 \\ &= y(t_0) + hf(t_0, y_0) + \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2y}{\mathrm{d}t^2}(\alpha)h^2. \end{aligned}$$

Om andraderivatan av y är begränsad, ger detta

$$|y_1 - y(t_1)| \leq Mh^2,$$

och det lokala felet är $O\left(h^2\right)$.

Det globala felet kan nu uppskattas som det lokala felet multiplicetar med antal steg. Om vi försöker lösa ekvationen på intervallet $[a, T]$ med N steg, har man

$$Nh = T - a,$$

och det globala felet kan uppskattas som

$$|y_N - y(t_N)| \approx h^2\frac{T - a}{h} = Ch.$$

Eulers metod för system av differentialekvationer Betrakta begynnelsevärdesproblemet

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{y}}{\mathrm{d}t}(t) = \mathbf{f}(t, \mathbf{y}(t)),$$
$$\mathbf{y}(a) = \mathbf{b}.$$

Eulers metod går ut på att

1. Dela upp intervallet vi vill lösa problemet på i diskreta steg, där steg n finns i punkten $t^n = a + nh$, där h är steglängden.

2. Linjarisera problemet till

$$y^{n+1} - y_n = \mathbf{f}(t^n, y^n)h,$$

   där $\mathbf{y}^n = \mathbf{y}(t^n)$.

En pseudokod-beskrivning av en lösning med startvillkor `t0` och `y0`, där denna är en lista med `M` element, steglängd `h` och `N` steg är:

```
define f(t, y)
input t0 and y0
input h and N
t = t0
y = y0
for 1 < i < N
        for 1 < j < M
                y[j] = y[j] + f[j](t, y)*h
        end
        t = t + h
end
```

Observera att `f` nu är en lista av `M` funktioner, och kom ihåg att högre ordningens ekvationer med en funktion kan skrivas som ett system av differentialekvationer.

Eulers metod bakåt Betrakta begynnelsevärdesproblemet

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t}(t) = f(t, y(t)),$$
$$y(a) = b.$$

Eulers metod bakåt går ut på att

1. Dela upp intervallet vi vill lösa problemet på i diskreta steg, där steg n finns i punkten $t_n = a + nh$, där h är steglängden.

2. Linjarisera problemet till

$$y_{n+1} - y_n = f(t_{n+1}, y_{n+1})h,$$

där $y_n = y(t_n)$. Detta ger en ekvation i y_{n+1} som måste lösas numeriskt.

9 Partiella differentialekvationer

Finita differensmetoden I finita differensmetoden approximerar vi derivator med finita differenser. Detta är helt analogt med vad som har gjorts för ordinarie differentialekvationer.

10 Stabilitet

Absolutstabilitet För allmänna numeriska problem säjs en numerisk metod vara absolutstabil om effekten av små initiala störningar försvinner när antal iterationer blir stort.

11 Egenvärdesberäkningar

Potensmetoden Potensmetoden är ett sätt att hitta det största egenvärdet till en matris på. Algoritmen går ut på att välja en startvektor x^0 och iterera enligt

$$x^{i+1} = \frac{1}{\|Ax^i\|}Ax^i, \lambda^{i+1} = (x^{i+1})^T Ax^{i+1}.$$

Detta kan alternativt skrivas som

$$v^{i+1} = Ax^i, \lambda^i = (x^i)^T v^{i+1}, x^{i+1} = \frac{1}{\|v^{i+1}\|}v^{i+1}.$$