ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΕΣΣΑΛΙΑΣ

ΤΜΗΜΑ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Μάθημα: ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΕΣ ΜΕΘΟΔΟΙ (5^{Ο} ΕΞΑΜΗΝΟ)

ΣΗΜΕΙΩΣΕΙΣ ΜΑΘΗΜΑΤΟΣ

Διδάσκων: Καθηγητής Δημήτρης Βαλουγεώργης

Χειμερινό εξάμηνο 2022-23

Βιβλιογραφία:

- S. C. Chapra and R. P. Canale (μετάφραση Φ. Κουτελιέρης και Α. Ι. Μάργαρης), Αριθμητικές μέθοδοι για μηχανικούς, Εκδόσεις Τζιόλα, 7η έκδοση, 2016.

- Γ. Δ. Ακρίβης και Β. Α. Δουγαλής, Εισαγωγή στην αριθμητική ανάλυση, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Κρήτης, 2004.

<u>ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ ΣΗΜΕΙΩΣΕΩΝ</u>

Κεφ. 3: Παρεμβολή (2 εβδομάδες)
3.1 Εισαγωγή
3.2 Πολυωνυμική παρεμβολή (Lagrange, Newton)
3.3 Κυβικές splines
3.4 Μέθοδος ελαχίστων τετραγώνων
3.5 Παρεμβολή με ορθογώνια πολυώνυμα

Κεφ. 4: Ολοκλήρωση (2 εβδομάδες)
4.1 Εισαγωγή
4.2 Εξισώσεις ολοκλήρωσης Newton Cotes (τραπεζίου, 1ος και 2ος κανόνας Simpson)
4.3 Ολοκλήρωση Gauss
    4.3.1 Πολυώνυμα Legendre, Laguerre, Chebyshev, Hermite
    4.3.2 Ολοκλήρωση Gauss-Legendre, Gauss- Laguerre, Gauss-Chebyshev και Gauss-Hermite

Κεφ. 5: Παραγώγιση (1 εβδομάδα)
5.1 Εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών με σειρά Taylor
5.2 Εκφράσεις πεπερασμένων διαφορών με πολυωνυμική παρεμβολή

Κεφ. 6: Επίλυση ελλειπτικών διαφορικών εξισώσεων με πεπερασμένες διαφορές – προβλήματα οριακών τιμών (2.5 εβδομάδες)

6.1 Εισαγωγή στη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών
6.2 Προβλήματα δύο οριακών τιμών – ΣΔΕ
6.3 Εξισώσεις πεπερασμένων διαφορών πέντε και εννέα σημείων - ΜΔΕ
6.4 Κυλινδρικές συντεταγμένες
6.5 Οριακές συνθήκες με παραγώγους
6.6 Παραδείγματα

Κεφ. 7: Συνήθεις διαφορικές εξισώσεις (ΣΔΕ) - προβλήματα αρχικών τιμών (2 εβδομάδες)

7.1 Εισαγωγή (ορισμός προβλήματος, αριθμητική ολοκλήρωση ΣΔΕ, αντικατάσταση ΣΔΕ τάξης *n* με *n* εξισώσεις 1ης τάξης)
7.2 Μέθοδος Euler
7.3 Μέθοδοι Runge-Kutta
7.4 Συστήματα συνήθων διαφορικών εξισώσεων
7.5 Σφάλματα, διάδοση σφαλμάτων , ευστάθεια και σύγκλιση

1. ΕΙΣΑΓΩΓΗ

1.1 Θεωρητική, πειραματική και υπολογιστική ανάλυση

Μέθοδος	Πλεονεκτήματα	Μειονεκτήματα
Θεωρητική	Γενική, ακριβής, ολοκληρωμένη λύση συνήθως υπό τη μορφή κλειστού τύπου - έκφρασης	Απλή γεωμετρία και φυσική Γραμμικά προβλήματα
Πειραματική	Ρεαλιστική περιγραφή του φαινομένου	Εξοπλισμός Τεχνικές δυσκολίες μέτρησης Μικρότερες διαστάσεις από τις πραγματικές Υψηλό κόστος προμήθειας και λειτουργίας
Αριθμητική ή **Υπολογιστική** (*Υπολογιστικό πείραμα*!)	Γραμμικά και μη γραμμικά προβλήματα Φυσική χωρίς απλουστεύσεις Χρονομεταβαλλόμενα φαινόμενα Χαμηλό κόστος	Σφάλματα υπολογιστών Μοντελοποίηση οριακών συνθηκών Διακριτοποίηση! (μπορεί να οδηγήσει και σε ποιοτική αλλοίωση)

1.2 Αριθμητική Ανάλυση και Αριθμητικές Μέθοδοι

Αριθμητική ανάλυση είναι ο κλάδος των μαθηματικών που ασχολείται με την ανάπτυξη αξιόπιστων αλγοριθμικών μεθοδολογιών για την υπολογιστική επίλυση μαθηματικών προβλημάτων.

Αριθμητικές μέθοδοι είναι η εφαρμογή αυτών μεθοδολογιών στη πράξη.

<u>Παράδειγμα</u>: Η επίλυση της αλγεβρικής εξίσωσης $3x^2 - 5x + 2 = 0$ επιτυγχάνεται αριθμητικά με την εφαρμογή του επαναληπτικού αλγόριθμου $x^{(k+1)} = \dfrac{5x^{(k)} - 2}{3x^{(k)}}$ όπου k είναι ο δείκτης της επανάληψης.

$$x^{(0)} = 2 \rightarrow x^{(1)} = 4/3 \rightarrow x^{(2)} = 7/6 \rightarrow x^{(3)} = 1.0952 \rightarrow x^{(4)} = 1.0580 \rightarrow ....$$

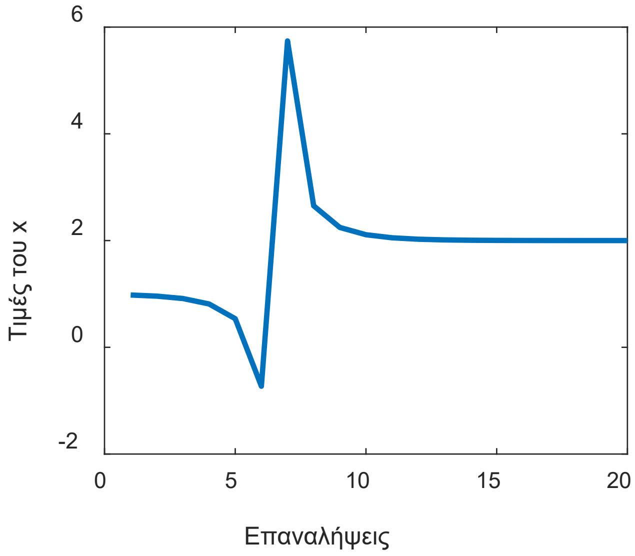
Πρόκειται για μια απλή αριθμητική μέθοδο που φαίνεται μετά από ικανό αριθμό επαναλήψεων να οδηγεί στην εύρεση μίας ρίζας της εξίσωσης ($x = 1$).

Όμως υπάρχουν ζητήματα που πρέπει να εξετασθούν όπως α) **αρχική εκτίμηση**, β) **σύγκλιση**, γ) **ακρίβεια**, κ.τ.λ.

Εάν εφαρμόσουμε την αντίστοιχη μεθοδολογία στην εύρεση ρίζας της εξίσωσης $x^2 - 3x + 2 = 0$ με αρχική εκτίμηση $x^{(0)} = 0.99$ θα δούμε ότι η επαναληπτική διαδικασία αποκλίνει και δεν συγκλίνει στη ρίζα $x = 1$ αλλά στην ρίζα $x = 2$!!!

$$x^{(k+1)} = \frac{3x^{(k)} - 2}{x^{(k)}}: \; x^{(0)} = 0.99 \to x^{(1)} = 0.98 \to x^{(2)} = 0.96 \to x^{(3)} = 0.92 \to x^{(4)} = 0.81 \to \ldots$$

Επαναλήψεις	x	Επαναλήψεις	x
1	0.98	8	2.65
2	0.96	9	2.25
3	0.92	10	2.11
4	0.81	11	2.05
5	0.54	12	2.03
6	-0.73	13	2.01
7	5.74	14	2.01



Η συστηματική μελέτη και ανάλυση των αριθμητικών αλγορίθμων αποτελούν αντικείμενο της αριθμητικής ανάλυσης ενώ η εφαρμογή των αλγορίθμων μαζί με τους συμπληρωματικούς κανόνες και τις οδηγίες που τους συνοδεύουν είναι το αντικείμενο των αριθμητικών μεθόδων.

Στο πλαίσιο του μαθήματος θα ασχοληθούμε με τις αριθμητικές μεθόδους.

Οι αριθμητικές μέθοδοι από μόνες τους δεν επιλύουν το πρόβλημα.
Θα πρέπει να προηγηθεί τα **μαθηματικό ή/και φυσικό μο**ντέλο που περιγράφει το πρόβλημα, στη συνέχεια να εφαρμοστεί η **αριθμητική μέθοδος** και να ακολουθήσει ο **προγραμματισμό**ς του αριθμητικού αλγορίθμου.

1.3 Αριθμητική κινητής υποδιαστολής και σφάλματα υπολογιστών

Έστω πραγματικός αριθμός $x = \pm.\left(d_1 d_2 \ldots d_t d_{t+1} \ldots\right)_t \cdot \beta^e$, $d_1 \neq 0$ όπου το κλάσμα $.d_1 d_2 \ldots d_t$ αποτελείται από t ψηφία ως προς τη βάση $\beta = \left[2,10,16\right]$ και e ακέραιος με $L \leq e \leq U$.

Στον υπολογιστή ο αριθμός **στρογγυλοποιείται** και γράφεται στη μορφή:

$$fl(x) = \pm.\left(d_1 d_2 \ldots d_t\right) \cdot \beta^e, \quad 0 \leq d_{t+1} < \beta / 2$$

ή

$$fl(x) = \pm\left[\left(.d_1 d_2 \ldots d_t\right)_\beta + \left(0.\underbrace{00\ldots1}_{\text{t ψηφία}}\right)\right] \cdot \beta^e, \quad \beta / 2 \leq d_{t+1} < \beta$$

t : αριθμός σημαντικών ψηφίων

<u>Πλεονέκτημα</u>: Σταθερό μήκος (χώρος) αποθήκευσης

<u>Μειονέκτημα</u>: Η απόσταση ανάμεσα σε ζευγάρια διαδοχικών αριθμών δεν είναι σταθερή.

Το **σφάλμα στρογγυλοποίησης** είναι $-\beta^{1-t} \le 2\varepsilon \le \beta^{1-t}$

Η ακρίβεια της αριθμητικής κινητής υποδιαστολής προκύπτει από το ε **της μηχανής**, δηλαδή του μικρότερου αριθμού κινητής υποδιαστολής ε ώστε $1+\varepsilon>1$:

```
EPS=1.
10 EPS=0.5xEPS
    EPS1=EPS+1
    WRITE EPS1
    WRITE EPS
    IF (EPS1.GT.1) GO TO 10
   WRITE EPS
```

EPS1=1.5$\to$ 1.25$\to$ 1.125$\to$ 1.0625$\to$ 1.03125$\to$ 1.015625$\to$ 1.00781$\to$ ….

EPS=0.5$\to$0.25$\to$ 0.125$\to$ 0.0625$\to$ 0.03125$\to$ 0.015625$\to$ 0.00781$\to$ ….

Μετά από πολλές και διάφορες πράξεις το αποτέλεσμα στρογγυλοποιείται ανάλογα με τον αριθμό των ψηφίων που αποθηκεύονται στον υπολογιστή. Εξαρτάται άμεσα από τα bits του υπολογιστή.

Σχετικό σφάλμα υπολογιστή: $\left|\frac{fl(x)-x}{x}\right|$ **Απόλυτο σφάλμα** υπολογιστή: $\left|fl(x)-x\right|$

<u>Παράδειγμα</u>: Να βρεθούν αριθμητικά οι ρίζες της $x^2 - 26x + 1 = 0$

Αναλυτικές ρίζες: $x_1 = 13 + \sqrt{168}$, $x_2 = 13 - \sqrt{168} = 0.038518603$

Σε υπολογιστή με 5 σημαντικά ψηφία $\sqrt{168} = 12.961 \Rightarrow$

Οι αριθμητικές ρίζες είναι: $r_1 = 13 + 12.961 = 25.961$, $r_2 = 13 - 12.961 = 0.039$

Σχετικά σφάλμα: $\left|\frac{r_1 - x_1}{x_1}\right| = 1.85\times 10^{-5}$, $\left|\frac{r_2 - x_2}{x_2}\right| = 1.25\times 10^{-2}$

Το σχετικό σφάλμα στη δεύτερη ρίζα είναι 3 τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο που ισοδυναμεί με απώλεια σημαντικών ψηφίων.

Το πρόβλημα διορθώνεται ως εξής:

$$r_2 = 13 - \sqrt{168} = 13 - \sqrt{168}\,\frac{13+\sqrt{168}}{13+\sqrt{168}} = \frac{13^2 - 168}{13+\sqrt{168}} = \frac{1}{25.961} = 0.038519$$

Τώρα το σχετικό σφάλμα είναι της ίδιας τάξης: 1.03×10^{-5}

Παράδειγμα:

Έστω οι πραγματικοί αριθμοί $x = \pi$ και $y = 22/7$. Σε υπολογιστή με αριθμητική 4 ψηφίων οι αριθμοί στρογγυλοποιούνται σε $x_N = 3.142$ και $y_N = 3.143$. Να υπολογιστούν τα σχετικά σφάλματα λόγω στρογγυλοποίησης όπως και το σφάλμα στρογγυλοποίησης της πράξης $x_N - y_N$.

Αναλυτικές τιμές: $x = 3.1415927$ $y = 3.1428571$

$$\left|rel\left(x_N\right)\right| = \left|\frac{3.1415927 - 3.142}{3.1415927}\right| = 0.0001296$$

$$\left|rel\left(y_N\right)\right| = \left|\frac{3.1428571 - 3.143}{3.1428571}\right| = 0.0000454$$

$$\left|rel\left(x_N - y_N\right)\right| = \left|\frac{\left(3.1415927 - 3.1428571\right) - \left(3.142 - 3.143\right)}{\left(3.1415927 - 3.1428571\right)}\right| = 0.2092$$

Το σχετικό σφάλμα του αποτελέσματος της αφαίρεσης είναι 3 και 4 τάξεις μεγέθους μεγαλύτερο σε σχέση με τα αντίστοιχα σφάλματα των αριθμών!

1.4 Ευστάθεια και δείκτης κατάστασης

Πολλά προβλήματα έχουν λύσεις που είναι ευαίσθητες σε μικρά υπολογιστικά λάθη. Στις περιπτώσεις αυτές εξετάζονται η **ευστάθεια** και ο **δείκτης κατάστασης** του αριθμητικού αλγορίθμου και της προκύπτουσας λύσης.

Έστω ένα φυσικό σύστημα που περιγράφεται από το μαθηματικό μοντέλο $F(x,y)=0$ όπου x η λύση (έξοδος) και y τα δεδομένα (είσοδος), ενώ η οντότητα F μπορεί να είναι μία συνάρτηση ή εξίσωση, κ.τ.λ.

Το πρόβλημα είναι ευσταθές όταν μικρές αλλαγές δy στα δεδομένα οδηγούν σε μικρότερες αλλαγές δx στα αποτελέσματα.

Ο δείκτης κατάστασης του συστήματος ορίζεται ως

$$K(x)=Max_{\delta y}\frac{\|\delta x\|/\|x\|}{\|\delta y\|/\|y\|}<1$$

Ασταθή προβλήματα έχουν $K(x)=\infty$, ενώ προβλήματα με μεγάλους δείκτες κατάστασης ($K(x)>100$ ή $K(x)>10$) ονομάζονται ιδιόμορφα (ill conditioned) προβλήματα.

<u>Παράδειγμα</u>: Να βρεθεί ο δείκτης κατάστασης του προβλήματος που περιγράφεται από

$$F(x,y)=x-a^{y}=0$$

$$F(x+\delta x,y+\delta y)=0\Rightarrow x+\delta x=a^{y+\delta y}\Rightarrow \delta x=a^{y+\delta y}-x\Rightarrow \frac{\delta x}{x}=\frac{a^{y+\delta y}-a^{y}}{a^{y}}=a^{\delta y}-1$$

$$K(x)=\frac{\|\delta x\|/\|x\|}{\|\delta y\|/\|y\|}=\left|y\frac{a^{\delta y}-1}{\delta y}\right|\simeq|y\ln a|$$

Το $K(x)$ είναι ανάλογο του y και όχι του δy!!!

Μερικοί πίνακες (ή συστήματα) είναι εξαιρετικά ευαίσθητοι σε μικρές αλλαγές ενώ άλλοι δεν είναι!

Παράδειγμα:

A)

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ x_1 + 1.0001x_2 &= 2.0001 \end{aligned}$$ Λύση: $x_1 = 1$, $x_2 = 1$

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 &= 2 \\ x_1 + 1.0001x_2 &= 2 \end{aligned}$$ Λύση: $x_1 = 2$, $x_2 = 0$

Το σύστημα είναι ασταθές επειδή μία μικρή αλλαγή στα δεδομένα συνεπάγεται μεγάλη αλλαγή στα αποτελέσματα.

B)

$$\begin{aligned} 0.0001x_1 + x_2 &= 1.0001 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$$ Λύση: $x_1 = 1$, $x_2 = 1$

$$\begin{aligned} 0x_1 + x_2 &= 1.0001 \\ x_1 + x_2 &= 2 \end{aligned}$$ Λύση: $x_1 = 0.9999$, $x_2 = 1.0001$

Το σύστημα είναι ευσταθές επειδή μία μικρή αλλαγή στα δεδομένα συνεπάγεται μία εξίσου μικρή αλλαγή στα αποτελέσματα.

Τα παραπάνω ισχύουν και στη περίπτωση των αριθμητικών υπολογισμών όπου το σύστημα είναι ο αριθμητικός αλγόριθμος συμπεριλαμβανομένου του υπολογιστή που τρέχει ο αλγόριθμος.

Εάν το φυσικό πρόβλημα είναι ασταθές τότε δεν υπάρχει αριθμητικός αλγόριθμος που θα μπορούσε να δώσει ευσταθή λύση.

Αντίθετα έχουμε ευσταθή προβλήματα που μπορεί με λανθασμένο αριθμητικό αλγόριθμο να εμφανίζονται ως ασταθή και για το λόγο αυτό πρέπει ανάλογα με το πρόβλημα να υιοθετείται ο κατάλληλος αριθμητικός αλγόριθμος.

Στο πλαίσιο του μαθήματος θα μελετήσουμε αριθμητικές μεθόδους και τα χαρακτηριστικά τους για την επίλυση συστημάτων αλγεβρικών εξισώσεων, συνήθων και μερικών διαφορικών εξισώσεων όπως και τον υπολογισμό παραγώγων, ολοκληρωμάτων και συναρτήσεων παρεμβολής.

<u>Ασκήσεις:</u>

<u>Άσκηση 1</u>

1α. Να στρογγυλοποιηθούν οι παρακάτω αριθμοί σε 4 σημαντικά ψηφία:

$$-17.0045, \quad -719.830, \quad 7234148, \quad \frac{3}{17}, \quad -\frac{2}{19}, \quad -\frac{8}{3}$$

1β. Να στρογγυλοποιηθούν οι παρακάτω αριθμοί σε 3 σημαντικά ψηφία και σε 3 δεκαδικά ψηφία:

$$-93917.0045, \quad 0.08330, \quad -0.08765, \quad 0.067351, \quad -0.8375005$$

1γ. Δίνεται η συνάρτηση $f\left(x\right)=\frac{x}{1+x^3}$. Να βρεθεί το ολικό σφάλμα στο σημείο x=0.12307 χρησιμοποιώντας ακρίβεια το πολύ 3 σημαντικά ψηφία.

Άσκηση 2

Πως ορίζεται και τι σημαίνει ο όρος flop στους επιστημονικούς υπολογισμούς. Βρείτε τον χρόνο που απαιτείται στον υπολογιστή σας για να εκτελέσετε 1Kflop, 1Mflop, 1Gflop, 1Tflop.

Άσκηση 3

Να υπολογισθούν οι ρίζες της αλγεβρικής εξίσωσης $x^2 + 3000.001x + 3 = 0$. Οι υπολογισμοί να γίνουν α) σε υποθετικό υπολογιστή πέντε σημαντικών ψηφίων και β) στον υπολογιστή σας για απλή και διπλή ακρίβεια.
Οι σωστές ρίζες της εξίσωσης είναι $x_1 = -0.001$ και $x_2 = -3000$.

Εάν το σχετικό σφάλμα είναι μεγαλύτερο του 1%, εφαρμόστε τον εναλλακτικό τύπο:

$$x_{1,2} = \frac{-2c}{b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}$$

Αφού αποδείξτε τον εναλλακτικό τύπο, εξετάστε το σχετικό σφάλμα των αποτελεσμάτων και εξηγήστε γιατί τα αποτελέσματα βελτιώνονται σημαντικά.

Άσκηση 4

Οι ρίζες της εξίσωσης $x^2 + 62.10x + 1 = 0$ είναι $x_1 = -0.01610723$ και $x_2 = -62.08390$.

Στην παραπάνω εξίσωση ισχύει ότι $b^2 >> 4ac$ και ο υπολογισμός του x_1 προϋποθέτει την αφαίρεση ανάμεσα σε περίπου ίσους αριθμούς. Έστω ότι οι υπολογισμοί γίνονται σε Η/Υ που αποθηκεύονται 4 σημαντικά ψηφία.

Να βρεθούν τα x_1 και x_2 και να υπολογισθεί το σχετικό σφάλμα.

Στην συνέχεια να υπολογισθούν πιο ακριβή αποτελέσματα εφαρμόζοντας τον τύπο:

$$x_1 = \frac{b^2 - \left(b^2 - 4ac\right)}{2a\left(-b - \sqrt{b^2 - 4ac}\right)}.$$

Άσκηση 5

Υπολογίστε την τιμή της συνάρτησης $f\left(x\right) = \dfrac{e^x - 1}{x}$ στο $x = 0.001$ κάνοντας τις πράξεις με 3 και 4 σημαντικά ψηφία και σχολιάστε τα αποτελέσματα.