2006–04–25

Grundläggande begrepp i numerisk analys

1. Matematiskt problem

   Numeriskt problem

   Algoritm

2. Stabilitet

3. Noggrannhet: matematiskt ekvivalenta uttryck kan ge numeriskt helt olika resultat.

   Exempel: $\sin^2\left(\frac{x}{2}\right) = \frac{1-\cos x}{2}$, $x = 0.05$, 3 siffrors precision:

   $$\sin^2(0.025) = (0.025)^2 = 6.25 \cdot 10^{-4}$$

   $$\frac{1-\cos(0.05)}{2} = \frac{1-0.999}{2} = [\text{kancellation}] = \frac{0.001}{2} = 5 \cdot 10^{-4}$$

4. Effektivitet:

   snabbhet, minneskrav

   Det finns en kurs i *High Performance Computing*, HPC.

5. Iteration

   Exempel: Newtons metod för ekvationslösning, $f(x) = 0$.

   $$x_k = x_{k-1} - \frac{f(x_{k-1})}{f'(x_{k-1})}$$

   Alla x_k är approximationer till x^* som är lösning till $f(x) = 0$.

6. Rekursion.

   Exempel: Eulers framåt-metod för ODE.

   $$\begin{cases} y' = f(t, y) \\ y(0) = c \end{cases}$$

   y_{k+1} och y_k approximerar olika storheter: $y(t_{k+1})$ respektive $y(t_k)$.

Felanalys, Heath 1.2

Definition: a är ett exakt värde, $\hat{a}$ en approximation.

absolut fel: $\delta a = \hat{a} - a$; **relativt fel**: $\frac{\delta a}{a} \approx \frac{\delta a}{\hat{a}}$.

a har t **korrekta decimaler** om $|\delta a| \leqslant 0.5 \cdot 10^{-t}$. Antalet **signifikanta siffror** är första icke-nollan till och med sista korrekta decimalen.

|||.

Exempel. $x = 0.01234 \pm 0.5 \cdot 10^{-5} = \hat{x} \pm 0.05 \cdot 10^{-5}$.

$\hat{x}$ har 5 korrekta decimaler. $\hat{x}$ har 4 signifikanta siffror.

$\hat{\pi} = 3.1416$ har 4 korrekta decimaler och 5 signifikanta siffror.

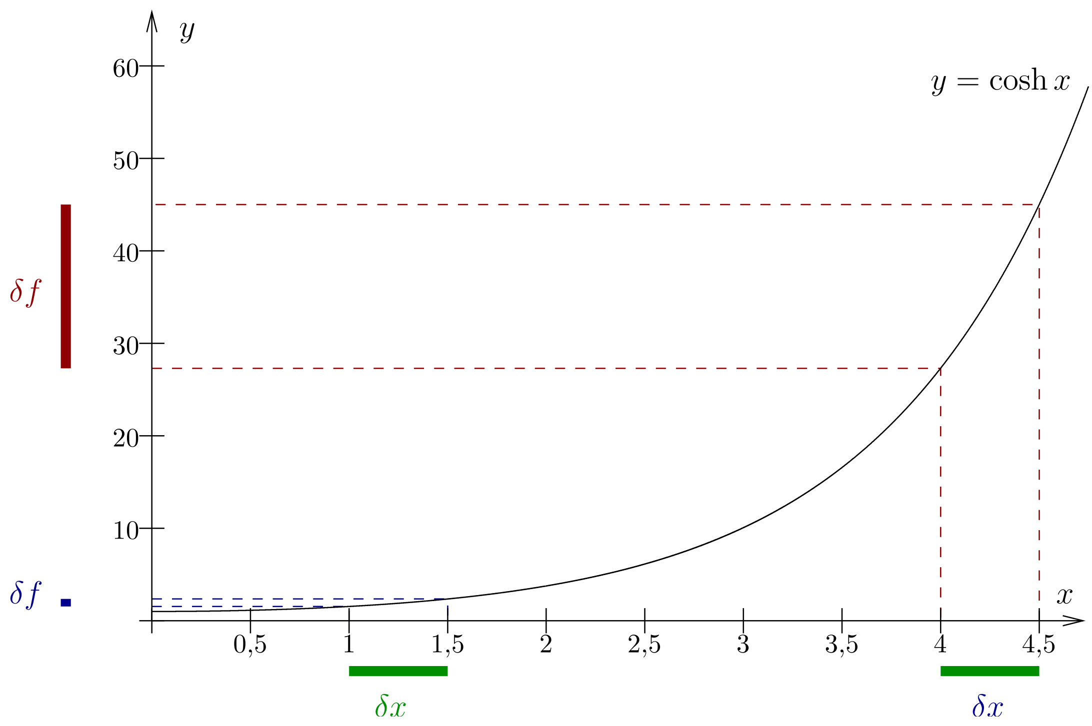
Felfortplantning, en variabel.

$$x = \hat{x} - \delta x$$

Vad händer om vi använder $\hat{x}$ i stället för x i en beräkning $f(\hat{x})$?

$$f(\hat{x}) - f(x) = f'(\xi)(\hat{x} - x), \quad \xi \in [x, \hat{x}]$$

$$\delta f \stackrel{\text{def}}{=\!=} f(\hat{x}) - f(x) = f'(\xi)\,\delta x \approx f'(\hat{x})\delta x$$



Figur 1. Felfortplantning: derivatans inverkan.

Exempel: Radien r hos en sfär är bestämd med 1% osäkerhet. Hur stor är osäkerheten i volymberäkning?

$$V(r) = \frac{4}{3}\pi r^3 \Longrightarrow V'(r) = 4\pi r^2$$

$$\frac{|\delta r|}{|r|} \leqslant 0.01 \Longrightarrow |\delta r| \lesssim 0.01 \cdot |\hat{r}|$$

$$|\delta V| \lesssim [\text{felfortplantningsformeln}] \lesssim |V'(\hat{r})| \cdot |\delta r| \lesssim 4\pi\hat{r}^2 \cdot 0.01\,\hat{r} =$$

$$= 4\pi\hat{r}^3 \cdot 0.01$$

$$\frac{|\delta V|}{|V|} \lesssim \frac{4\pi\hat{r}^3 \cdot 0.01}{\frac{4}{3}\pi\hat{r}^3} = 0.03 = 3\%$$

ANMÄRKNING: Om $f'(\hat{x})$ är nära noll så duger inte formeln. Man får ta med fler termer i Taylorutvecklingen.

$$f(\hat{x})-f(x)=f'(\xi)\cdot(\hat{x}-x)+\frac{f''(\xi)}{2}(\hat{x}-x)^2$$

EXEMPEL. $f(x)=x^2+2x-1$. Anta att vi vet x med 1% osäkerhet. Hur noggrant kan vi bestämma $f(-1)$?

$$f'(x)=2x+2, \quad f'(-1)=0, \quad f''(x)=2$$

$$\frac{|\delta x|}{|x|}\leqslant 0.01$$

$$\delta f=f''(\xi)\frac{(\hat{x}-x)^2}{2}=(\hat{x}-x)^2=(\delta x)^2$$

$$|x|=1 \Longrightarrow |\delta x|\leqslant 0.01 \Longrightarrow |\delta f|\leqslant 10^{-4}$$

$$f(-1)=-2 \quad \Longrightarrow \quad \frac{|\delta f|}{|f|}=0.5\cdot 10^{-4}$$

f kan anges med en relativ osäkerhet på $0.5\cdot 10^{-4}$.

Felfortplantning, allmänna fallet

$$f(\boldsymbol{x})=f(x_1,x_2,\ldots,x_n), \quad \boldsymbol{x}=\begin{pmatrix} x_1\\ \vdots \\ x_n\end{pmatrix}$$

$$\delta\boldsymbol{x}=\begin{pmatrix} \delta x_1\\ \vdots \\ \delta x_n\end{pmatrix}, \quad \hat{x}_i=x_i+\delta x_i$$

$$\delta f=f(\hat{\boldsymbol{x}})-f(\boldsymbol{x})=\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial x_k}(\boldsymbol{x}+\theta\cdot\delta\boldsymbol{x})\,\delta x_k, \quad 0\leqslant\theta\leqslant 1$$

$$\approx\sum_{k=1}^{n}\frac{\partial f}{\partial x_k}(\hat{\boldsymbol{x}})\cdot\delta x_k=\nabla f(\hat{\boldsymbol{x}})^T\delta\boldsymbol{x}$$

EXEMPEL. $f(x,y)=\frac{x}{y}$.

$$\frac{\partial f}{\partial x}=\frac{1}{y}, \quad \frac{\partial f}{\partial y}=-\frac{x}{y^2}$$

$$\delta f=\frac{\partial f}{\partial x}\cdot\delta x+\frac{\partial f}{\partial y}\cdot\delta y=\frac{1}{y}\cdot\delta x-\frac{x}{y^2}\cdot\delta y=\frac{y\cdot\delta x-x\cdot\delta y}{y^2}$$

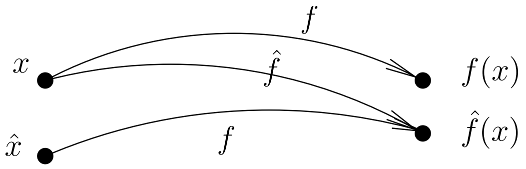
dvs

$$\frac{\delta f}{f}=\frac{\delta x}{x}-\frac{\delta y}{y} \quad \text{och} \quad \left|\frac{\delta f}{f}\right|\leqslant\left|\frac{\delta x}{x}\right|+\left|\frac{\delta y}{y}\right|$$

Framåt- och bakåtfel $\hat{f}$ är en approximation av f.

Framåtfelet i x: $\hat{f}(x)-f(x)$.

Låt nu $\hat{x}$ definieras av att $f(\hat{x}) = \hat{f}(x)$. Då är bakåtfelet $\hat{x} - x = f^{-1}\Big(\hat{f}(x)\Big) - x$.



Figur 2.

Exempel.

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \cdots \approx 1 - \frac{x^2}{2} \quad \text{nära } x = 0$$

För $x = 0.1$ är framåtfelet $1 - \frac{0.1^2}{2} - \cos(0.1) = -4.16 \cdot 10^{-6}$.

Bakåtfelet: $\arccos\Big(1 - \frac{0.1^2}{2}\Big) - 0.1 = 4.17 \cdot 10^{-5}$.

Anmärkning. Approximationen $\hat{f}$ av f är stabil om bakåtfelet är litet.

Flyttalsaritmetik (Datoraritmetik), Heath 1.3.

Exempel. fix-punkt (fixtal): $12.34567, -0.00135, 2468.02468$: samma antal decimaler.

Flyttal ("flytpunkt"): $1.2346 \cdot 10^1, -1.3549 \cdot 10^{-3}, 2.4680 \cdot 10^3$: samma antal värdesiffror.

Vi använder i exempel ofta flyttalssystemet $(10, 5, -9, 9)$, där 10 är basen, 5 antalet siffror, -9 minsta värde på exponenten och 9 största värde på exponenten. I allmänhet (β, t, L, U). Innehåller tal på flyttalsform, $x = m \cdot \beta^e$ där m är mantissan, $m \pm d_0, d_1 d_2 d_3 \ldots d_t$ (Obs: inte multiplikation. Tolka så: skriv först siffran d_0, därefter ett kommatecken, därefter siffran d_1, osv.)

För siffrorna gäller $0 \leqslant d_i < \beta$ och $d_0 \neq 0$, för exponenten gäller $L \leqslant e \leqslant U$.

Anmärkning: $\beta = 2 \Longrightarrow d_0 = 1$: behöver inte lagras.

underflow-gräns: β^L, i exempelsystemet: $1.0000 \cdot 10^{-9}$.

overflow-gräns: $\beta^{U+1}(1 - \beta^{-t})$, i exempelsystemet: $9.9999 \cdot 10^9 = 10^{10}(1 - 10^{-5})$.

gradual underflow: tal mellan 0 och β^L kan lagras, men med lägre precision. Man tillåter då $d_0 = 0$, men dessa tal har sämre noggrannhet.

Speciella talvärden: `Inf`, fås om man exempelvis gör 1.0/0.0; `NaN`, exempelvis 0.0/0.0.

Precision Låt $\mathrm{fl}(x)$ vara det algrade talet motsvarande x.

$$\frac{|\mathrm{fl}(x) - x|}{|x|} \leqslant \mu = \frac{1}{2} \cdot \beta^{1-t} \tag{1}$$

μ kallas avrundingsenheten. Från (1) följer $\mathrm{fl}(x) = x(1 + \varepsilon), |\varepsilon| \leqslant \mu$.

Enkel precision: $(2, 24, -126, 127)$.

Dubbel precision: $(2, 53, -1022, 1023)$.

Detta är IEEE[1]-standard.

1. IEEE står för *Institute of Electrical and Electronics Engineers.*