Repetition

Felkalkyl
Kondition/Stabilitet
Richardsonextrapolation
Icke-linjära ekvationer
Ekvationssystem

Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Felkalkyl

Begrepp
Felkällor
Felfortplantning

2

Teknisk-vetenskapliga beräkningar
Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Grundbegrepp

- *Närmevärde*
  ā närmevärde till det exakta värdet a
- *Absolut fel* i ā : $\Delta a = \bar{a} - a$
- *Relativt fel* i ā : $\Delta a/a$, $(a \neq 0)$

$a = \sqrt{2}$, $\bar{a} = 1.414$
$\Delta a = a - \bar{a} = -2.1356E-4$
$|\Delta a| \leq 2.2E-4$
$|\Delta a/a| \leq 2E-4$

3

Teknisk-vetenskapliga beräkningar
Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Korrekta decimaler – signifikanta siffror

- om $|\Delta a| \leq 0.5 \cdot 10^{-t}$ sägs närmevärdet ha t korrekta decimaler
- alla siffror i positioner med enhet $\geq 10^{-t}$ sägs vara signifikanta
- Ekvivalenta uttryck :
  $a = 1.414$, $|\Delta a| \leq 0.22E-3$ — 3 korrekta decimaler
  $a = 1.414 \pm 0.22E-3$ — 4 signifikanta siffror
  $1.41378 \leq a \leq 1.41422$

4

Teknisk-vetenskapliga beräkningar
Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Felkällor - approximationer

Val av modell
- idealiseringar

Fel i indata
- mätvärden med begränsad noggrannhet

Avrundningsfel
- ändlig aritmetik

Trunkeringsfel
- en oändlig process ersätts med en ändlig

5

Teknisk-vetenskapliga beräkningar
Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Enkla operationer

addition
$$x_1 + x_2 = y$$
$$\bar{x}_1 + \bar{x}_2 = \bar{y}$$
$$\Delta y = \bar{y} - y = \bar{x}_1 + \bar{x}_2 - (x_1 + x_2) = \Delta x_1 + \Delta x_2$$

subtraktion
$$x_1 - x_2 = y$$
$$\bar{x}_1 - \bar{x}_2 = \bar{y}$$
$$\Delta y = \bar{y} - y = \bar{x}_1 - \bar{x}_2 - (x_1 - x_2) = \Delta x_1 - \Delta x_2$$

6

Teknisk-vetenskapliga beräkningar
Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Felgränser

- Oftast känner man bara gränser för de absoluta felen
- Triangelolikheten används :

$$x_1 - x_2 = y$$
$$\bar{x}_1 - \bar{x}_2 = \bar{y}$$
$$\Delta y = \bar{y} - y = \bar{x}_1 - \bar{x}_2 - (x_1 - x_2) = \Delta x_1 - \Delta x_2$$
$$|\Delta y| = |\Delta x_1 - \Delta x_2| \le |\Delta x_1| + |\Delta x_2|$$

Multiplikation & division

- Mer komplicerade beräkningar ger att relativa felen adderas vid multiplikation och division

$$x_1 \cdot x_2 = y \qquad \bar{x}_1 \cdot \bar{x}_2 = \bar{y}$$
$$\bar{y} = \bar{x}_1 \cdot \bar{x}_2 = (x_1 + \Delta x_1) \cdot (x_2 + \Delta x_2) =$$
$$= x_1 \cdot x_2 + \Delta x_1 \cdot x_2 + \Delta x_2 \cdot x_1 + \Delta x_1 \cdot \Delta x_2$$
$$\approx x_1 \cdot x_2 + \Delta x_1 \cdot x_2 + \Delta x_2 \cdot x_1$$
$$\Delta y = \bar{x}_1 \cdot \bar{x}_2 - x_1 \cdot x_2 \approx \Delta x_1 \cdot x_2 + \Delta x_2 x_1$$
$$\frac{\Delta y}{y} \approx \frac{\Delta x_1 \cdot x_2 + \Delta x_2 \cdot x_1}{x_1 \cdot x_2} = \frac{\Delta x_1}{x_1} + \frac{\Delta x_2}{x_2}$$

liten

Differentialkalkylens mv-sats

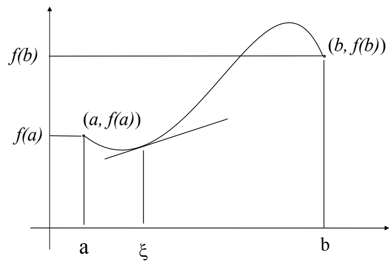
Låt $y=f(x)$, $a \le x \le b$
- f är kontinuerlig i $[a,b]$
- f är deriverbar i $]a,b[$

Då finns minst en punkt ξ i $]a,b[$ där tangenten till funktionskurvan är parallell med kordan mellan ändpunkterna.

Derivatan $f'(\xi)$ i punkten ξ uppfyller alltså

$f'(\xi) = \dfrac{f(b) - f(a)}{(b-a)}$, dvs $\quad f(b) - f(a) = (b-a) f'(\xi)$

Medelvärdessatsen geometriskt



Kondition/stabilitet

Konditionen hos ett problem

Ett problem sägs vara *illakonditionerat/störningskänsligt* om en liten störning i indata kan ge upphov till en stor störning i utdata.

Annars sägs problemet vara *välkonditionerat*

Illa-konditionerad matris

1

$$\begin{array}{ccccc} A_2 & \backslash & b & = & x \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 1.0000 & 1.0000 \\ 1.0000 & 1.0001 \end{bmatrix} \backslash \begin{bmatrix} 2.0000 \\ 2.0000 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.0000 \\ 0 \end{bmatrix}$$

2

$$\begin{array}{ccccc} A_2 & \backslash & b & = & x \end{array}$$
$$\begin{bmatrix} 1.0000 & 1.0000 \\ 1.0000 & 1.0001 \end{bmatrix} \backslash \begin{bmatrix} 2.0000 \\ 2.0001 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1.0000 \\ 1.0000 \end{bmatrix}$$

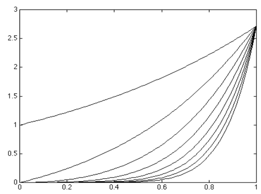
```
»norm(A2)
ans =
 2.0001
»cond(A2)
ans =
 4.0002e+04
```

Liten ändring i b ger stor ändring i x

Stabilitet hos en algoritm/metod

En algoritm/metod som inte nämnvärt bidrar till att avrundningsfelen tillväxer för ett (illakonditionerat) problem, sägs vara *stabil* eller *robust*.

$x^n e^x$



Stabilitet

- Beräkna $\quad I_n = \int_0^1 x^n e^x dx, \qquad n = 0 \ldots 100$
- Matematisk kan detta göras med partiell integration

$$I_n = \int_0^1 x^n e^x dx = \left[\frac{x^{n+1}}{n+1} e^x \right]_0^1 - \int_0^1 \frac{x^{n+1}}{n+1} e^x dx =$$
$$= \frac{e}{n+1} - \frac{1}{n+1} I_{n+1} \Leftrightarrow I_{n+1} = e - (n+1) I_n$$

Exempel …

- Enkelt att beräkna I_0
  $I_0 =$ e - 1 = 1.71828…
- Rekursionsformeln
  I_n+1 = e - (n+1)·I_n
- ger enkelt
  I_1 = e - I_0 = e - (e - 1) = 1
  I_2 = e - 2·I_1 = 2.71828… - 2·1 = 0.71828…
  …

MATLAB-körning

```
  n    In
  1    1.0000
  2    0.7183
  3    0.5634
  4    0.4645
  5    0.3956
...
 16    0.1503
 17    0.1624
 18   -0.2043
 19    6.5991
 20 -129.2637
...
 98   -0.501344442411.0e+138
 99    0.49633099798881.0e+140
100   -0.4963309979888091.0e+142
```

```
I(1) = 1;
e=exp(1);
for n=1:99
  I(n+1) = e - (n+1)*I(n);
end % for
```

Matematiskt...

- då
  $0 < x < 1$
  gäller
  $x^n > x^{n+1}$
  för alla
  $n \geq 0$
  därför måste
  $I_0 > I_1 > I_2 > \ldots > I_{100}$
  och alla
  $I_n > 0$

Fel introduceras

- Relativa noggrannheten 10^{-16}

$$I_2 = 0.71828\ldots \pm 10^{-16}$$
$$I_3 = e - 3 \cdot I_2 = e - 3 \cdot (0.71828\ldots \pm 10^{-16}) \pm 10^{-16} = 0.5634\ldots \pm 4 \cdot 10^{-16}$$

- ny avrundning tillfogas
- tidigare fel multipliceras med 3

Rekursionsformeln baklänges

Avrundat till 4 dec.

n	In
110	0.5000
109	0.0202
108	0.0248
107	0.0249
…	
100	0.0267
99	0.0269
98	0.0272
…	
20	0.1238
19	0.1297
18	0.1362
17	0.1434
…	
3	0.5634
2	0.7183
1	1.0000

$$I_n = \frac{e - I_{n+1}}{n+1}$$

$0 < I_{110} < I_1 = 1$ så $I_{110} = 0.5 \pm 0.5$

```
I(110) = 0.5;
e = exp(1);
for n=109:-1:1
  I(n) = (e - I(n+1))/(n+1);
end % for
```


Vad händer med felet nu?

- Insättning av I_{110} = $I_{110} = 0.5 \pm 0.5$

$$I_{109} = \frac{e - 0.5 \pm 0.5}{110} \pm 10^{-16} = 0.0202 \pm 0.00454$$

$$I_{108} = \frac{e - 0.0202 \pm 0.00454}{109} \pm 10^{-16} = 0.0202 \pm 0.00454$$

- 10^{-16} övre gräns för avrundningsfelet vid division

$$(\text{fel i } I_n) = \frac{1}{n+1}(\text{fel i } I_{n+1}) \pm 10^{-16}$$

I MATLAB...

- Denna beräkning sägs vara stabil
- "de gamla avrundningsfelen växer inte"

n	I_n	fel i I_n
110	0.5	0.5
109	0.0201	4.55e-03
108	0.0248	4.17e-05
107	0.0249	3.86e-07
...		
100	0.0267	1.01e-16
99	0.0269	1.01e-16
98	0.0272	1.01e-16
...		
20	0.1239	1.04e-16
19	0.1298	1.05e-16
18	0.1363	1.05e-16
17	0.1435	1.05e-16
...		
3	0.5634	1.30e-16
2	0.7183	1.44e-16
1	1.0000	1.72e-16

Richardsonextrapolation

Derivator
Integraler

Richardsonextrapolation

Allmänt gäller :

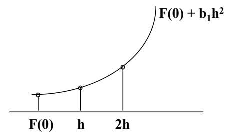
- F(h) beräknas för steglängder h, qh, q^2h, … dvs. en fast kvot mellan successiva steglängder
- vi känner trunkeringsfelet i F(h)

$$F(h) = F(0) + a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + a_3 h^{p_3} + \dots$$

p_1, p_2, p_3 kända

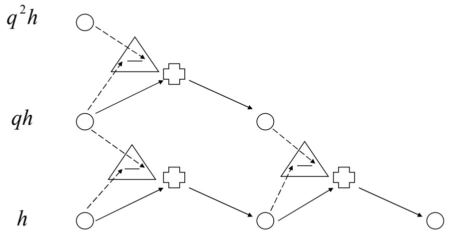
Vad extrapoleras?

- eliminering av termer i trunkeringsfelet till F(h)
- extrapolerar från två h-värden till h=0



Räkneschemat

$$h \quad F_1(h) \quad \frac{\Delta}{(q^{p_1}-1)} \quad F_2(h) \quad \frac{\Delta}{(q^{p_2}-1)} \quad F_3(h)$$



När är vi nöjda?

- Korrektionerna eliminerar ett trunkeringsfel prop. mot h^2 och h^4
  - dessa bör avta nedåt i kolumnen successivt med faktorn 2^2 och 2^4
- När detta beteende upphör inverkar andra fel än trunkeringsfel
- om *h* litet är differensen mellan två närliggande kolumn-värden en övre gräns för trunkeringsfelet

Skattning av Derivator

- Taylorutveckling ger

$$f(t_0+h) = f(t_0) + hf'(t_0) + \frac{h^2}{2} f''(t_0) + \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(t_0) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(t_0) + \dots$$

$$f(t_0-h) = f(t_0) - hf'(t_0) + \frac{h^2}{2} f''(t_0) - \frac{h^3}{3!} f^{(3)}(t_0) + \frac{h^4}{4!} f^{(4)}(t_0) - \dots$$

vilket kan avändas som bevis för att

$$\frac{f(t_0+h) - f(t_0)}{h} = f'(t_0) + O(h)$$

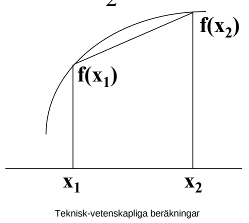
$$\frac{f(t_0) - f(t_0-h)}{h} = f'(t_0) + O(h)$$

$$\frac{f(t_0+h) - f(t_0-h)}{2h} = f'(t_0) + O(h^2)$$

Skattning av integraler

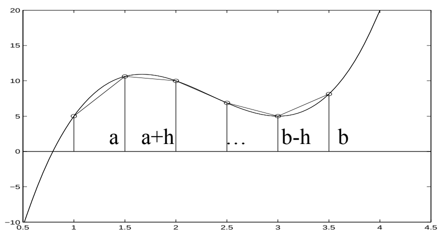
Approximera med rät linje

$$\text{Ytans area} = \frac{1}{2}(f(x_1) - f(x_2)) \cdot (x_2 - x_1)$$



Parallelltrapets

Mindre delintervall



Trapetsregeln

$x_{i+1} - x_i = h$ ger att

$$\int_a^b f(x)\partial x \approx \frac{1}{2}\left(f(x_0) + f(x_1)\right)\cdot h + \frac{1}{2}\left(f(x_1) + f(x_2)\right)\cdot h + \ldots$$

$$\ldots + \frac{1}{2}\left(f(x_{n-2}) + f(x_{n-1})\right)\cdot h + \frac{1}{2}\left(f(x_{n-1}) + f(x_n)\right)\cdot h =$$

$$= h\left(\frac{1}{2} f(x_0) + f(x_1) + \ldots + f(x_{n-1}) + \frac{1}{2} f(x_n)\right)$$

Trapetsregeln

Icke linjära ekvationer

Iterativa metoder

Konvergens

Grundidé

- bestäm en grov approximation till roten
- konstruera en talföljd som konvergerar mot roten

En sådan metod kallas iterationsmetod

- Hur konstruerar man metoden?
- När hittar man roten? (Konvergens)
- Feluppskattning

Iterationsmetoder

- Intervallhalvering
- Sekantmetoden $\quad x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{\dfrac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}}}$
- Newton-Raphson $\quad x_{n+1} = x_n - \dfrac{f(x_n)}{f'(x_n)}$
- Fixpunktsmetoden $\quad x_{n+1} = \varphi(x_n)$

När konvergerar det?

- Vi har fixpunktsiterationen $x_{n+1} = \varphi(x_n)$
- sätt $\varepsilon_n = x_n - x^*$
- $\varepsilon_n \to = 0$ då $x_n \to x^*$

$\varepsilon_n = x_n - x^* =$
$= \varphi(x_{n-1}) - \varphi(x^*)$ = [medelv.satsen]
$= \varphi'(\xi_n)(x_{n-1} - x^*) =$
$= \varphi'(\xi_n)\,\varepsilon_{n-1}$

Konvergens...

- Om $|\varphi'(\xi_n)| \leq m < 1$ något m, så gäller $|\varepsilon_n| \leq |\varphi'(\xi_n)| \cdot |\varepsilon_{n-1}| \leq m \cdot |\varepsilon_{n-1}| < |\varepsilon_{n-1}|$
- Så om $|\varphi'(x)| \leq m < 1$ i en omgiving av x^* som också innehåller x_0 , kommer x_n att konvergera mot x^*.
- $|\varepsilon_n| \leq m \cdot |\varepsilon_{n-1}| < m^2 |\varepsilon_{n-2}| < \ldots < m^n |\varepsilon_0|$
- m kan skattas med $(x_{n+1} - x_n)/(x_n - x_{n-1})$

37 Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Linjär ekvationssystem

Konditionstal
Interpolation/approximation
Faktoriseringar – LU, QR, SVD

38 Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Handräkning

Vad gör man ?

- Nollställ varje kolumn under huvuddiagonalen
- gör samtidigt samma operationer på högerledet
- Lös det triangulära systemet med bakåtsubstitution
- Överför matrisen på triangulär form genom att eliminera obekanta ur ekvationerna

39 Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

LU-faktorisering

- Gausselimination med partiell pivotering (på ickesingulär matris)

$$PA = LU$$

- Lös $Ax = b$

$$PAx = Pb$$
$$LUx = Pb$$
$$Ly = Pb$$
$$Ux = y$$

40 Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Konditionstal

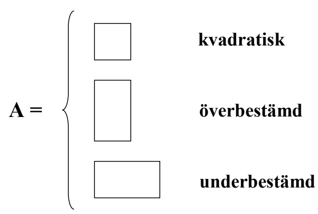
- Det exakta systemet $Ax = b$, har den exakta lösningen x
- En störning i b ger en störning i x $A(x + \Delta x) = b + \Delta b$
- Relativa störningen i lösningen blir

$$\frac{\|\Delta x\|}{\|x\|} \leq \|A\| \cdot \|A^{-1}\| \frac{\|\Delta b\|}{\|b\|}$$

41 Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Ax=b

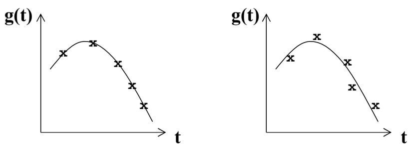


42 Teknisk-vetenskapliga beräkningar

Pedher Johansson
Department of Computing Science, Umeå University

Interpolation och approximation

Diskret information ⇒ Kontinuerlig information



Interpolation och approximation

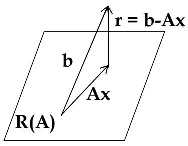
Interpolation

- Stämmer väl med givna data
- Känsligt för fel i data

Approximation

- Mindre känsligt för fel i data
- Stämmer mindre väl med givna data

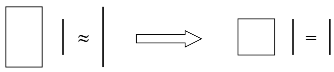
Minsta-norm-lösningar



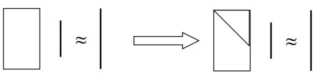
$$\min_x \| \mathrm{r}(x) \|_2^2$$

Normalekvationerna…

$\mathbf{Ax} \approx \mathbf{b}$ $\qquad$ $\mathbf{A^T Ax} = \mathbf{A^T b}$

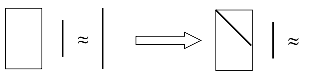


QR



$$Ax = b$$
$$\Downarrow [A=QR]$$
$$\begin{bmatrix} R \\ 0 \end{bmatrix} x = Q^T b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$
$$x = R^{-1} b_1$$

SVD



$$Ax = b$$
$$\Downarrow [A=UDV^T]$$
$$\begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} V^T x = \begin{bmatrix} \Sigma \\ 0 \end{bmatrix} y = U^T b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$
$$y = \Sigma^{-1} b_1$$
$$x = Vy$$