MNUM Numerické výpočty

Tomáš Raček

Univerzita Mikuláše Koperníka

23. 2. 2013

Něco na zahřátí

1. $$\frac{d\left(T + \delta_{TR}\frac{\alpha_T \Phi_s}{R_d T_{st}}\right)}{dt} = \frac{d\left(\delta_{TR}\frac{\alpha_T \Phi_s}{R_d T_{st}}\right)}{dt} + \frac{RT}{c_p}\frac{\omega}{\Pi} + F_T$$

2. $$x^3 \log(x + 10) = \tan(x - 1)^2$$

3. $$x \cos x = 1$$

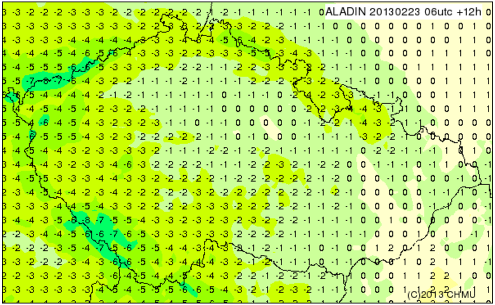
Co mají tyto rovnice společného?

Nelze je řešit analyticky.

ALADIN

- **ALADIN** – předpovědní model počasí používaný v ČR
- rovnice teploty:

$$\frac{d\left(T + \delta_{TR}\frac{\alpha_T \Phi_s}{R_d T_{st}}\right)}{dt} = \frac{d\left(\delta_{TR}\frac{\alpha_T \Phi_s}{R_d T_{st}}\right)}{dt} + \frac{RT}{c_p}\frac{\omega}{\Pi} + F_T$$



Citát

God does not care about our mathematical difficulties.
He integrates empirically.

Albert Einstein

Přístupy k řešení

Analytický přístup

- založen na symbolických úpravách
- krajní případy lze jednoduše studovat
- nestačí na řešení většiny reálných problémů

Numerický přístup

- založen na číselných aproximacích
- často poměrně přímočarý
- potřeba vizualizace
- mezní případy mohou činit obtíže (0/0)

Aplikace numerických metod

- chemie (návrh nových struktur, modelování dějů)
- biologie (populační, epidemiologické modely)
- fyzika (dynamika kapalin)
- klimatické modely, předpovědi počasí
- astronomie
- ekonomie
- strojírenství
- a mnoho dalších

Nelineární rovnice

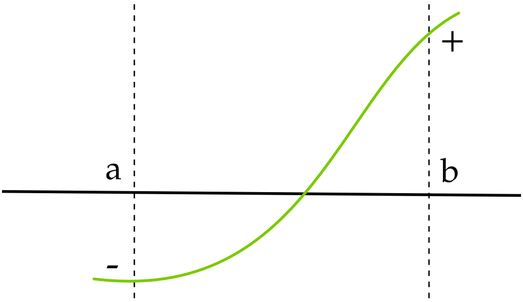
- uvažujme pouze funkce jedné proměnné
- naším cílem je nalézt kořen, tj. řešení rovnice $f(x) = 0$
- jen velmi malou část příkladů lze řešit analyticky
- vzorce pro speciální případy (kvadratická, kubická rovnice,...)

Naivní přístup k řešení:

- zvolme velikost kroku Δx
- v rámci intervalu $[a, b]$, ve kterém hledáme kořen, vyhodnocujeme $f(a), f(a + \Delta x), f(a + 2\Delta x), \ldots, f(b)$
- pro malá Δx časově velmi náročné

Separace kořene

Věta:
Nechť f je funkce spojitá na $[a; b]$ a $f(a) \cdot f(b) < 0$.
Pak $\exists c \in (a; b) : f(c) = 0$.



Metoda půlení intervalu

Bisekce (f, l, r, ϵ)

1. pokud je dosaženo kritérium zastavení, skonči
2. $x = (l + r)/2$
3. pokud $f(l) \cdot f(x) < 0$, pak Bisekce (f, l, x, ϵ),
   jinak Bisekce (f, x, r, ϵ)

Kritéria zastavení

- ϵ – zvolená přesnost
- $|l - r| < \epsilon$
- $|f((l + r)/2)| < \epsilon$

Vlastnosti

- důsledně zachovává separaci kořene $\rightarrow$ vždy konvergentní
- pomalá

Newtonova metoda I – představení

- někdy také metoda tečen
- vychází z Taylorova rozvoje zanedbáním členů vyšších řádů

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k$$

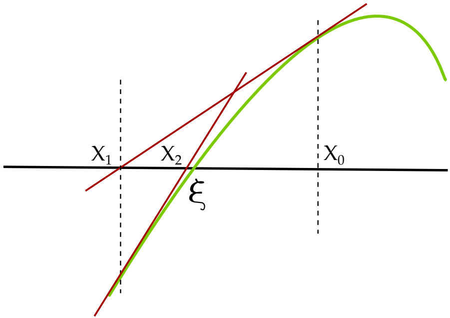
$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \ldots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + R_n$$

Vzoreček:

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

Newtonova metoda II – vlastnosti

- nutná dobrá počáteční aproximace
- kvadratická konvergence $\rightarrow$ jedna iterace zvyšuje počet platných číslic zhruba dvakrát
- užitečná při dolaďování výsledku



Newtonova metoda III – aplikace

Reciproká odmocnina $y = 1/\sqrt{x}$

- často se vyskytuje v aplikacích (např. norma vektoru: $\frac{\mathbf{v}}{\|\mathbf{v}\|}$)
- obsahuje výpočetně náročné operace – dělení a odmocninu
- její aproximaci lze ale spočítat rychle

Newtonova metoda pro $y = 1/\sqrt{x}$
$\rightarrow$ hledáme kořen funkce $1/y^2 - x = 0$.

$$
\begin{aligned}
y_{k+1} &= y_k - \frac{1/y_k^2 - x}{(1/y_k^2 - x)'} = y_k - \frac{y_k^{-2} - x}{-2y_k^{-3}} \\
y_{k+1} &= \frac{3y_k^{-2} - x}{2y_k^{-3}} = \frac{y_k(3 - xy_k^2)}{2}
\end{aligned}
$$

Newtonova metoda IV – Quake III

```
float Q_rsqrt(float number)
{
  long i;
  float x2, y;
  const float threehalfs = 1.5F;

  x2 = number * 0.5F;
  y = number;
  i = *(long *) &y; // evil floating point bit level hacking
  i = 0x5f3759df - (i >> 1); // what the f_ck?
  y = *(float *) &i;

 y = y * (threehalfs - (x2 * y * y)); // 1st iteration
// y = y * (threehalfs - (x2 * y * y));
// 2nd iteration, this can be removed

  return y;
}
```

Obyčejné diferenciální rovnice 1. řádu

Ve zkratce:

- obecně tvaru $F(x, y, y') = 0$
- řešením je funkce $y = f(x)$

Příklad:

$$y' = 2xy$$

Řešení:

$$\begin{aligned}
\frac{dy}{y} &= 2x\,dx && y \neq 0 \\
\ln|y| &= x^2 + C_1 && C_1 \in \mathbb{R} \\
|y| &= e^{x^2 + C_1} = C_2\,e^{x^2} && C_2 \in \mathbb{R}^+ \\
y &= C_3\,e^{x^2} && C_3 \in \mathbb{R} \setminus \{0\}
\end{aligned}$$

Funkce $y = 0$ je také řešením $\rightarrow$ $\mathbf{y = Ce^{x^2}}, \mathbf{C} \in \mathbb{R}$.

S-I-R model I – úvod

- jednoduchý epidemiologický model
- použitelný pro nemoci jako jsou spalničky nebo příušnice

- **Susceptible** – nikdy nepřišli do kontaktu s nemocí
- **Infectious** – šíří nemoc, zůstávají infekční po nějakou dobu
- **Recovered** – již prodělali nemoc a jsou vůči ní imunní

S-I-R model II – rovnice

- $X(t)$ – množství lidí v kategorii X v čase t
- β – míra kontaktu
- ν – míra uzdravení

S-I-R model v rovnicích:

$$
\begin{aligned}
\frac{dS}{dt} &= -\beta I(t)S(t) \\
\frac{dI}{dt} &= \beta I(t)S(t) - \nu I(t) \\
\frac{dR}{dt} &= \nu I(t)
\end{aligned}
$$

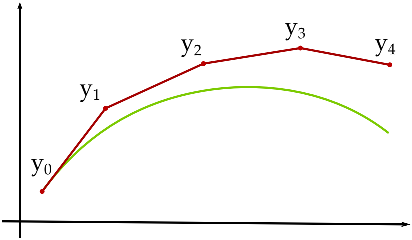
Eulerova dopředná metoda

- jednoduchá metoda pro řešení (systémů) dif. rovnic ve tvaru

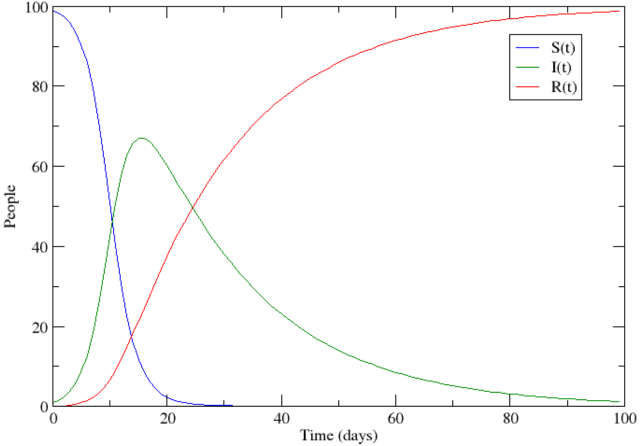
$$\frac{dy}{dt} = f(t, y(t))$$

- postupně počítáme

$$y_{n+1} = y_n + \Delta t \cdot \left.\frac{dy}{dt}\right|_{t_n}$$



S-I-R model III – výsledky



Integrál I – zadání

Spočtěte následující integrál:

$$\int_0^1 x^{16} e^{x-1}\, dx$$

Obecněji:

$$\begin{aligned} J_n &= \int_0^1 x^n e^{x-1}\, dx \\ J_n &= \left[x^n e^{x-1}\right]_0^1 - \int_0^1 n x^{n-1} e^{x-1}\, dx \\ \mathbf{J_n} &= \mathbf{1 - nJ_{n-1}} \end{aligned}$$

Zřejmě navíc $J_0 = 1 - 1/e$.

Integrál II – implementace

Implementace:

```
main() {
        float Jn = 1.0 - (1.0 / 2.7182818284590452354);
        for(int i = 1; i <= 16; i++) {
                Jn = 1 - i * Jn;
                printf("J_%02d = %12.3f\n", i, Jn);
        }
}
```

Integrál II – implementace

Implementace:

```
main() {
        float Jn = 1.0 - (1.0 / 2.7182818284590452354);
        for(int i = 1; i <= 16; i++) {
                Jn = 1 - i * Jn;
                printf("J_%02d = %12.3f\n", i, Jn);
        }
}
```

Výsledek:

```
J_01 =        0.368
     .
     .
     .
J_16 =  -191438.344
```

Něco je špatně.

Reprezentace čísel I – úvod

Celá čísla – datový typ int

- 32 bitů
- rozsah od $-2\,147\,483\,648$ do $2\,147\,483\,647$
- resp. 0 až $4\,296\,967\,295$ pro neznaménkový typ
- odpovídá binárnímu zápisu čísla
- v rámci rozsahu naprosto přesné výpočty, mimo něj nesmysly

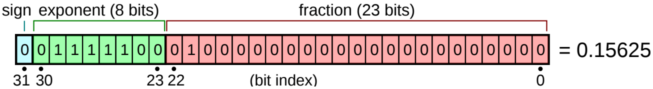
Reálná čísla

- konečná velikost paměti vs. nekonečně mnoho reálných čísel
- nutno zvolit odlišný přístup

Reprezentace čísel II – reálná čísla

Reálná čísla – datový typ float

- 32 bitů
- číslo je uloženo ve tvaru $(-1)^{sign} \cdot mantissa \cdot 2^{exponent}$



- nejmenší kladné zobrazitelné číslo: $1,18 \cdot 10^{-38}$
- největší zobrazitelné číslo $\approx 3,4 \cdot 10^{38}$
- 6 platných číslic
- speciální hodnoty: $\pm\infty$, NaN

Úskalí konečné reprezentace I – porovnávání

Jednoduchá porovnání:

`0.5 + 0.5 == 1.0? True.`

`0.1 + 0.2 == 0.3? False.`

- některá čísla nelze vyjádřit přesně
  (0.1 $\rightarrow$ 1.0000000149011611e-1)
- výsledek je téměř vždy zatížen chybou předchozího výpočtu
- operátor == nemá pro reálná čísla moc smysl

Porovnáváme-li dvě reálná čísla, použijme raději test na dostatečnou blízkost: $\mid x - y \mid < \epsilon$

Úskalí konečné reprezentace II – nepřesnost sčítání

Spočtěte s přesností na tři platné číslice $1,23 + 0,001$:

- výsledek $1,23$
- v rámci přesnosti korektní

Ale co v tomto případě?

$$1,23 + \underbrace{0,001 + \ldots + 0,001}_{10} = 1,23$$

vs.

$$1,23 + (0,001 + \ldots + 0,001) = 1,24$$

Sčítání reálných čísel není asociativní.

$\rightarrow$

Sčítejme vždy nejdříve čísla se srovnatelným exponentem.

Úskalí konečné reprezentace III – katastrof. zrušení

Uvažme příklad $1,23 - 1,22$:

- binární reprezentace: $1,0011101$ a $1,0011100$
- vstupní hodnoty zatíženy chybami $0,3$ %, resp. $0,1$ %
- rozdíl binárně $0,0000001$

- rozdíl desítkově $0,0078125$
- správný výsledek je $0,01$
- relativní chyba **22** %!

Snažme se vyhnout odečítání dvou blízkých čísel. Není-li to možné, počítejme s potenciálně velkou chybou.

Gaussova eliminační metoda (GEM)

- řešení systému lineárních rovnic
- princip: eliminace prvků pod diagonálou
- problém, pokud je vedoucí prvek v aktuálním řádku (pivot) blízký nule $\rightarrow$ GEM není stabilní $\rightarrow$ **v praxi se nepoužívá**

Stabilita metody

- intuitivně: malá chyba na vstupu neovlivní výrazně výsledek

GEM s částečným výběrem vedoucího prvku

- prohození dvou řádků výsledek neovlivní
- princip: jako vedoucí prvek volím ten, který je v absolutní hodnotě největší
- **stabilní**

Integrál III – analýza problému

$$J_{16} = \int_0^1 x^{16} e^{x-1}\, dx \not\approx -\mathbf{191438.344}$$

Kde se stala chyba?

- J_0 zatížen chybou na vstupu
- v každé iteraci násobíme aktuální hodnotou n
- rozvoj rekurentní formule pro J_{16} obsahuje $16!J_0$

Potřebujeme jiný způsob výpočtu.

Integrál IV – řešení

$$J_{n-1} = \frac{1 - J_n}{n}$$

- v každém kroku bude chyba redukována faktorem $1/n$
- nutno nalézt počáteční hodnotu

$$\int_0^1 x^n e^{x-1}\,dx \leq \int_0^1 x^n\,dx = \frac{1}{n+1}$$

- pro $n = 20$ platí $J_{20} \leq 1/21$
- zvolme $J_{20} = 0$
- pak $J_{16} \approx \mathbf{0,05571}89$
- správná hodnota $\mathbf{0,05571}93\ldots$

Shrnutí hlavních myšlenek

- chceme umět popisovat přírodní zákonitosti a děje, na jejich základě pak dělat predikce, odvozovat vlastnosti ap.
- rovnice, které tímto popisem vzniknou, většinou nelze řešit analyticky
- díky masivnímu nárůstu výpočetních kapacit lze ale často poměrně přímočaře využít numerických metod
- je velmi snadné dostat špatný výsledek, pokud si nedám pozor