Politechnika Wrocławska

Animacje i symulacje zjawisk, obiektów i systemów

Wykład nr 5

Podstawowe metody numeryczne

Szymon Datko

szymon.datko@pwr.edu.pl

Wydział Informatyki i Telekomunikacji,

Politechnika Wrocławska

semestr zimowy 2021/2022

Część I

Miejsca zerowe

Zagadnienie

- mamy daną funkcję $f(x)$ stopnia n,
  - poszukujemy parametrów x_0, x_1, ..., x_k,
  - takich, że $f(x_i) = 0$,*
  - będzie ich co najwyżej n;
- jeśli $f(x)$ jest dana analitycznie, to zazwyczaj można znaleźć rozwiązanie dokładne, odpowiednio przekształcając wzór,
- czasem jednak trzeba ograniczyć się jedynie do przybliżenia.

* – tak naprawdę, szukana wartość może być dowolna, jeśli odpowiednio przesuniemy wykres funkcji przed zadaniem.

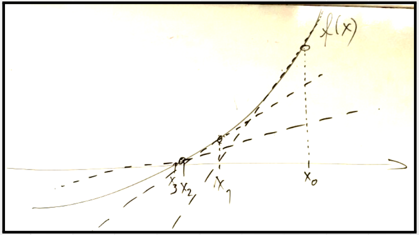
Bisekcja

- pomysł: jeśli znaki wartości funkcji $f(x)$ w punktach a i b są różne (i funkcja $f(x)$ jest ciągła), to na pewno istnieje na przedziale $[a, b]$ taki punkt x_0, że $f(x_0) = 0$,
- matematycznie efektywny jest podział przedziału $[a, b]$ na pół,
- algorytm:
  - wybierz punkty a i b oraz wyznacz punkt $c = \frac{b-a}{2}$,
  - oblicz wartość wyrażenia $y = f(c) \cdot f(b)$,
  - jeśli $y < 0$ to przypisz $a = c$, w przeciwnym razie $b = c$,
  - powtarzaj do uzyskania określonej dokładności $|f(c)| < \epsilon$, albo tak długo, aż nie przekroczono zadanej liczby powtórzeń.

Metoda siecznych

- czasem dobre przybliżenie miejsca zerowego x_0 można znaleźć szybciej, wykorzystując przy tym znajomość przebiegu funkcji,
- jeśli znamy wartości w punktach x_1 i x_0, możemy wyznaczyć punkt x_2, poruszając się wzdłuż pochodnej w punkcie x_1,
- analogicznie można wyznaczać kolejne wartości, ogółem:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \cdot \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})} \quad ;$$



Część II

Różniczkowanie

Wzór Taylora

- mamy daną funkcję $f(x)$,
- znamy jej wartość w punkcie x_0, czyli $f(x_0)$,
- chcemy poznać wartość w punkcie x_s, czyli $f(x_s)$,

$$f(x_s) = \sum_{n}^{k=0} \frac{1}{k!} \cdot f^{(k)}(x_0) \cdot (x_s - x_0)^k \; + \; E_n(x_s, x_0)$$

$$E_n(x_s, x_0) = \int_{x_0}^{x_s} \frac{(x_s - x_0)^{n+1}}{(n+1)!} \cdot f^{(n+1)}(t) \; dt$$

Pochodna funkcji w punkcie

- założmy, że znamy wartość $f(x)$ oraz $f(x+h)$,
- rozwinięcie wzoru Taylora dla $f(x+h)$:

$$f(x+h) = f(x) + h \cdot f'(x) + \frac{1}{2} \cdot h^2 \cdot f''(\xi) \quad ;$$

- stąd otrzymujemy wzór na wartość **pierwszej pochodnej**:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - \frac{1}{2} \cdot h \cdot f''(\xi) \quad ,$$

- przy małym kroku h, błąd metody także jest mały.

Pochodna funkcji w punkcie, ale lepiej

- analogicznie rozwinięcie wzoru Taylora, ale dokładniejsze:

$$f(x+h) = f(x) + h \cdot f'(x) + \frac{1}{2} \cdot h^2 \cdot f''(x) + \frac{1}{3!} \cdot h^3 \cdot f'''(\xi_1) \quad ,$$

$$f(x-h) = f(x) - h \cdot f'(x) + \frac{1}{2} \cdot h^2 \cdot f''(x) - \frac{1}{3!} \cdot h^3 \cdot f'''(\xi_2) \quad ;$$

- wyznaczamy różnicę pomiędzy tymi wyrazami:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2 \cdot h \cdot f'(x) + 2 \cdot \frac{1}{3!} \cdot h^3 \cdot [f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)] \quad ;$$

- otrzymujemy dokładniejszy wzór na **pierwszą pochodną**:

$$f'(x) = \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2 \cdot h} - \frac{1}{6} \cdot h^2 \cdot f'''(\xi) \quad .$$

Druga pochodna funkcji w punkcie

- zastosujmy te same rozwinięcia dla $f(x+h)$ oraz $f(x-h)$,
  - uwzględniając jednak dodatkowy wyraz $\frac{1}{4} \cdot h^4 \cdot f^{(i'''')}(\xi_i)$,
- wyznaczamy wartość następującego wyrażenia:

$$f(x+h)+f(x-h)-2\cdot f(x) = h^2\cdot f''(x)+2\cdot\frac{1}{4!}\cdot h^4\cdot[f''''(\xi_1)+f''''(\xi_2)]$$

- po przekształceniu, uzyskujemy wzór na **drugiej pochodnej**:

$$f''(x) = \frac{f(x+h)-2\cdot f(x)+f(x-h)}{h^2} - \frac{1}{12}\cdot h^2\cdot f'''(\xi) \quad .$$

Politechnika Wrocławska

Część III

Całkowanie

Wzór trapezów

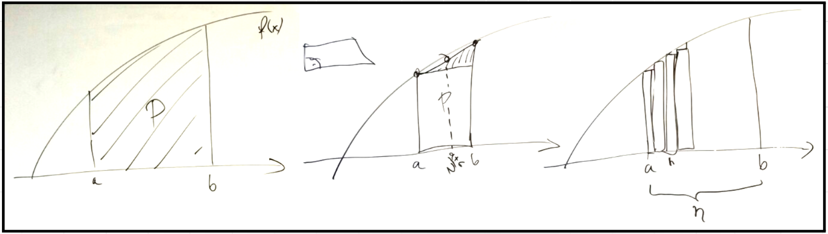
- wartość całki oznaczonej z funkcji $f(x)$ na przedziale $[a, b]$ odpowiada polu obszaru pomiędzy osią X i wykresem $f(x)$,
- obszar $[a, b]$ można potraktować jako wysokość trapezu,
- wtedy $f(a)$ oraz $f(b)$ stanowią jego podstawy,
- w takim wypadku całkę można przybliżyć polem trapezu:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{1}{2} \cdot (b - a) \cdot [f(a) + f(b)] \quad + O(h^3)$$

Złożony wzór trapezów

- poprawę metody uzyskuje się przez podział dziedziny i sumę:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{2}\cdot(x_{k+1}-x_k)\cdot[f(x_k)+f(x_{k+1})]$$



Wzór Simpsona

- dokładniejsze rozwiązanie można otrzymać, jeśli przebieg funkcji $f(x)$ przybliży się równaniem kwadratowym,
- oryginalną funkcję interpoluje się metodą Lagrange'a, używając wartości w punktach a i b oraz pośrednim $\frac{b-a}{2}$,
- wynikowe wyrażenie jest następujące:

$$\int_a^b f(x)\,dx = \frac{b-a}{6}\cdot\left[f(a) + 4\cdot f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right] - \frac{1}{90}\cdot\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 f''''(\xi)$$

- analogiczną metodę można wykorzystać przy uwzględnieniu większej liczby punktów pośrednich, albo stosując sklejanie.

Politechnika Wrocławska

Część IV

Równania liniowe

Metoda eliminacji Gaussa

- dany jest układ równań liniowych, postaci:

$$\begin{cases} w_1 = a \cdot x + b \cdot y + c \cdot z \\ w_2 = d \cdot x + e \cdot y + f \cdot z \\ w_3 = g \cdot x + h \cdot y + i \cdot z \end{cases}$$

- budowana jest z niego macierz, następującej postaci:

$$\left[\begin{array}{ccc|c} a & b & c & w_1 \\ d & e & f & w_2 \\ g & h & i & w_3 \end{array}\right]$$

- za pomocą operacji elementarnych należy sprowadzić lewą część powyższej macierzy do postaci macierzy jednostkowej.

Metoda eliminacji Gaussa – algorytm

$$\left[\begin{array}{ccc|c} a & b & c & w_1 \\ d & e & f & w_2 \\ g & h & i & w_3 \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} a & b & c & w_1 \\ 0 & e' & f' & w_2' \\ 0 & h' & i' & w_3' \end{array}\right] \rightarrow \cdots \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} a & 0 & 0 & w_1''' \\ 0 & e' & 0 & w_2' \\ 0 & 0 & i'' & w_3'' \end{array}\right]$$

$$\rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} a & 0 & 0 & w_1''' \\ 0 & e' & 0 & w_2' \\ 0 & 0 & i'' & w_3'' \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} \frac{a}{a} & 0 & 0 & \frac{w_1'''}{a} \\ 0 & \frac{e'}{e'} & 0 & \frac{w_2'}{e'} \\ 0 & 0 & i''/i'' & \frac{w_3''}{i''} \end{array}\right] \rightarrow \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 0 & 0 & \frac{w_1'''}{a} \\ 0 & 1 & 0 & \frac{w_2'}{e'} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{w_3''}{i''} \end{array}\right]$$

- Po kolei – dla każdego i-tego wiersza macierzy:
  - Odejmij i-ty wiersz od wszystkich pozostałych tyle razy, aby wyzerować wszystkie wartości poza i-tą w i-tej kolumnie.
- Na koniec podziel wartość każdy wiersz przez pozostałą w nim wartość.
- Na początku można sprawdzić, czy macierz da się zdiagonalizować.

Część V

Równania różniczkowe

Zagadnienie

- rozwiązując równanie, poszukujemy pasującej:
  - liczby, np. $x = 7$, w przypadku równania klasycznego,
  - funkcji, np. $f(t) = 3t^2$, w przypadku równania różniczkowego;
- istnieją metody analityczne znajdowania odpowiednich funkcji,
- nie są one jednak uniwersalne, często bardzo szczególne,
- czasem postać analityczna odpowiedniej funkcji nie istnieje,
- wtedy funkcję reprezentujemy po prostu jako tablicę wartości.

Metoda Eulera

- określona jest funkcja pochodna, chcemy poznać pierwotną,
- formalna definicja pochodnej funkcji $f(x)$ w punkcie t to

$$\frac{df(t)}{dt} = \frac{f(t+dt) - f(t)}{dt},$$

- załóżmy, że jako dane początkowe znamy wartość funkcji $f(t)$,
- przekształcając wzór, możemy wyznaczyć kolejną wartość

$$f(t+dt) = f(t) + \frac{df(t)}{dt} \cdot dt,$$

- mniejszy krok dt $\rightarrow$ kolejne wartości obliczone dokładniej.

Metoda Runge-Kutty

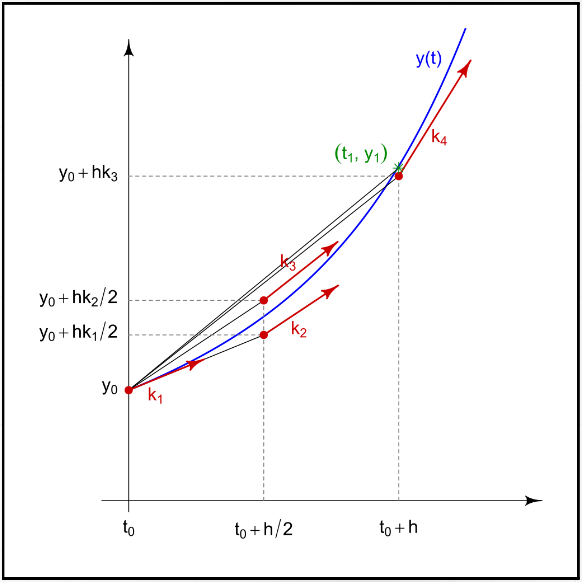
- rodzina metod iteracyjnego rozwiązywania równań,
- typowo stosowana jest formuła rzędu 4,

$$f(t+dt) = f(t) + \frac{1}{6} \cdot (k_1 + 2 \cdot k_2 + 2 \cdot k_3 + k_4)$$

$$k_1 = dt \cdot \frac{df(t)}{dt}$$
$$k_2 = dt \cdot \frac{d\left(f(t+\frac{1}{2}dt) + \frac{1}{2}k_1\right)}{dt}$$
$$k_3 = dt \cdot \frac{d\left(f(t+\frac{1}{2}dt) + \frac{1}{2}k_2\right)}{dt}$$
$$k_4 = dt \cdot \frac{d\left(f(t+dt) + k_3\right)}{dt}$$

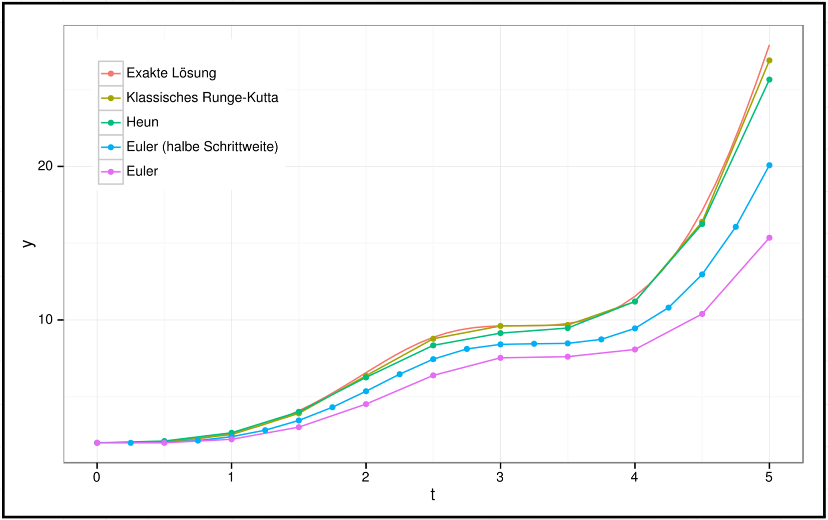
- w szczególnym przypadku (rzędu 1.) jest to Metoda Eulera.

Metoda Runge-Kutty – ilustracja



Źródło obrazka: https://en.wikipedia.org/wiki/Runge%E2%80%93Kutta_methods

Porównanie dokładności metod



Źródło obrazka: https://en.wikipedia.org/wiki/Runge%E2%80%93Kutta_methods

Politechnika Wrocławska

To wszystko na dziś.

Do zobaczenia za tydzień!