

Εισαγωγή στην Αριθμητική Ανάλυση

Σταμάτης Σταματιάδης
stamatis@materials.uoc.gr

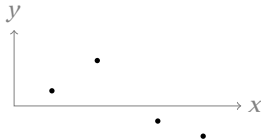
Τμήμα Επιστήμης και Τεχνολογίας Υλικών,
Πανεπιστήμιο Κρήτης

ΕΒΔΟΜΗ ΔΙΑΛΕΞΗ

Προσέγγιση συνάρτησης (1/2)

Μαθηματικό Πρόβλημα

Για μια άγνωστη συνάρτηση $f(x)$ ξέρουμε τις τιμές της, f_0, f_1, \dots, f_n , στα σημεία x_0, x_1, \dots, x_n (με $x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_n$):



Ζητούμε να υπολογίσουμε:

- την τιμή της f ή κάποιας παραγώγου της σε ένα σημείο \bar{x} στο (x_0, x_n) ,
- το ολοκλήρωμα της f σε κάποιο διάστημα (μέσα στο $[x_0, x_n]$),
- τη ρίζα της f στο $[x_0, x_n]$, κλπ.

Προσέγγιση συνάρτησης (2/2)

Λύση

Προσεγγίζουμε την $f(x)$ με άλλη συνάρτηση. Η τιμή που προκύπτει από τη νέα συνάρτηση για το ζητούμενο ελπίζουμε ότι πλησιάζει αυτή της $f(x)$.

Παρατήρηση

Οι τεχνικές που θα παρουσιάσουμε μπορούν να εφαρμοστούν και στην περίπτωση που έχουμε μια γνωστή συνάρτηση $f(x)$, η οποία είναι εξαιρετικά πολύπλοκη. Γι' αυτό, θέλουμε να την προσεγγίσουμε σε κάποιο διάστημα με απλή συνάρτηση.

Προσέγγιση με πολυώνυμο

- Υπάρχει ένα και μοναδικό πολυώνυμο βαθμού n που περνά από τα $n + 1$ σημεία (x_i, f_i) .
- Για να το προσδιορίσουμε, σχηματίζουμε ένα πολυώνυμο $p(x)$, n βαθμού, με $n + 1$ άγνωστους συντελεστές, και απαιτούμε να ικανοποιεί τις $n + 1$ σχέσεις $p(x_i) = f_i$.
- Οι εξισώσεις είναι γραμμικές ως προς τους άγνωστους συντελεστές. Ανάλογα με τη μορφή που θα επιλέξουμε για πολυώνυμο, η επίλυση των εξισώσεων είναι πολύπλοκη ή απλή.

Το συγκεκριμένο πολυώνυμο λέγεται *πολυώνυμο παρεμβολής*.

Προσέγγιση με πολυώνυμο

Ανάπτυγμα σε μονώνυμα

Αν $p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$, οι σχέσεις $p(x_i) = f_i$ γίνονται

$$a_0 + a_1x_0 + \dots + a_{n-1}x_0^{n-1} + a_nx_0^n = f_0$$

$$a_0 + a_1x_1 + \dots + a_{n-1}x_1^{n-1} + a_nx_1^n = f_1$$

$$\vdots \quad \quad \quad \vdots$$

$$a_0 + a_1x_n + \dots + a_{n-1}x_n^{n-1} + a_nx_n^n = f_n$$

Προσέξτε ότι οι άγνωστοι είναι οι $n + 1$ συντελεστές a_i .

Με πίνακες το σύστημα γράφεται

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \\ \vdots \\ f_n \end{bmatrix}.$$

Ο πίνακας των συντελεστών είναι ο πίνακας Vandermonde.

Το σύστημα έχει **μοναδική λύση** και μπορεί να λυθεί με την απαλοιφή Gauss ή πιο γρήγορες μεθόδους που εκμεταλλεύονται την ειδική μορφή του (Björck-Pereyra).

Προσέγγιση με πολυώνυμο

Ανάπτυγμα σε πολυώνυμο Newton (1/2)

Μπορούμε να επιλέξουμε να έχει το πολυώνυμο τη μορφή

$$p(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots + a_n \prod_{j=0}^{n-1} (x - x_j) ,$$

δηλαδή, να είναι ανάπτυγμα στα πολυώνυμα της βάσης Newton,

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i q_i(x) , \quad \text{όπου} \quad q_i(x) = \begin{cases} 1 , & i = 0 , \\ \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j) , & i = 1, 2, \dots, n . \end{cases}$$

Προσέγγιση με πολυώνυμο

Ανάπτυγμα σε πολυώνυμο Newton (2/2)

Οι εξισώσεις $p(x_i) = f_i$ όταν το $p(x)$ είναι ανάπτυγμα στη βάση Newton γίνονται τριγωνικό σύστημα

$$\begin{aligned} a_0 &= f_0 \\ a_0 + a_1(x_1 - x_0) &= f_1 \\ a_0 + a_1(x_2 - x_0) + a_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) &= f_2 \\ &\vdots \\ &\vdots \end{aligned}$$

Επιλύεται εύκολα, σταδιακά: $a_0 = f_0$ και

$$a_j = \frac{1}{q_j(x_j)} \left(f_j - \sum_{i=0}^{j-1} a_i q_i(x_j) \right), \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Πλεονέκτημα: Εύκολα συμπεριλαμβάνεται κι άλλο σημείο.

Προσέγγιση με πολυώνυμο

Ανάπτυγμα στη βάση Lagrange

Αν

$$p(x) = \sum_{i=0}^n a_i \ell_i(x) ,$$

όπου

$$\ell_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} , \quad i = 0, 1, 2, \dots, n ,$$

τα πολυώνυμα n βαθμού της βάσης Lagrange, τότε οι εξισώσεις $p(x_i) = f_i$ γίνονται

$$\sum_{i=0}^n a_i \ell_i(x_j) = f_j \Rightarrow a_j = f_j , \quad j = 0, 1, \dots, n$$

καθώς $\ell_i(x_j) = \delta_{ij}$.

Επομένως, το πολυώνυμο παρεμβολής είναι

$$p(x) = \sum_{i=0}^n f_i \ell_i(x) .$$

Προσέγγιση με πολυώνυμο

Παράδειγμα (1/2)

Μια άγνωστη συνάρτηση περνά από τα σημεία $(2.0, 0.5)$, $(2.5, 0.4)$, $(4.0, 0.25)$. Το πολυώνυμο παρεμβολής, υπολογιζόμενο από τον τύπο Lagrange, είναι

$$p(x) = \ell_0(x)f_0 + \ell_1(x)f_1 + \ell_2(x)f_2 = 0.5\ell_0(x) + 0.4\ell_1(x) + 0.25\ell_2(x) ,$$

όπου

$$\ell_0(x) = \frac{(x - x_1)(x - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} = \frac{(x - 2.5)(x - 4)}{(2 - 2.5)(2 - 4)} = x^2 - 6.5x + 10 ,$$

$$\ell_1(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} = \frac{(x - 2)(x - 4)}{(2.5 - 2)(2.5 - 4)} = -4(x^2 - 6x + 8)/3 ,$$

$$\ell_2(x) = \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} = \frac{(x - 2)(x - 2.5)}{(4 - 2)(4 - 2.5)} = (x^2 - 4.5x + 5)/3 .$$

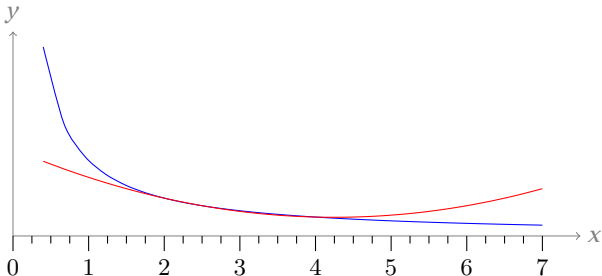
Άρα $p(x) = 0.05x^2 - 0.425x + 1.15$.

[Η πραγματική συνάρτηση είναι η $f(x) = 1/x$.]

Προσέγγιση με πολυώνυμο

Παράδειγμα (2/2)

Γραφική παράσταση της $f(x) = 1/x$ (μπλέ γραμμή) και της $p(x) = 0.05x^2 - 0.425x + 1.15$ (κόκκινη γραμμή).



Παρατήρηση

Δεν μπορούμε να κάνουμε αξιόπιστους υπολογισμούς με την $p(x)$ έξω από το διάστημα παρεμβολής $[x_0, x_n]$.

Προσέγγιση με πολυώνυμο

Σφάλμα

Το σφάλμα της προσέγγισης της $f(x)$ από το πολυώνυμο παρεμβολής $p(x)$ στο σημείο $x \in [x_0, x_n]$ είναι

$$|f(x) - p(x)| = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i),$$

όπου ξ ένα σημείο στο (x_0, x_n) .

Παρατήρηση

Αν το διάστημα $[x_0, x_n]$ είναι μικρό και χρησιμοποιούμε μικρού βαθμού πολυώνυμο έχουμε μικρό σφάλμα (καλή προσέγγιση). Αν οι αποστάσεις $x - x_i$ γίνουν μεγάλες (π.χ. αν το x είναι εκτός του διαστήματος παρεμβολής), το σφάλμα είναι μεγάλο.

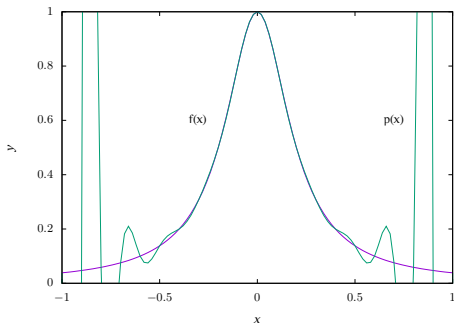
Προσέγγιση με πολυώνυμο

Φαινόμενο Runge (1/2)

Πολυώνυμο παρεμβολής μεγάλου βαθμού μπορεί να παρουσιάσουν έντονη ταλαντωτική συμπεριφορά στα ακραία διαστήματα μεταξύ σημείων που ισαπέχουν.

Παράδειγμα

Προσέγγιση της συνάρτησης $f(x) = 1/(1 + 25x^2)$ στο $[-1, 1]$ με πολυώνυμο $p(x)$ 20^{ου} βαθμού σε ισαπέχοντα σημεία.



Προσέγγιση με πολυώνυμο

Φαινόμενο Runge (2/2)

Αν έχουμε δυνατότητα επιλογής των σημείων παρεμβολής, μπορούμε να αντιμετωπίσουμε το φαινόμενο Runge.

Αν διαλέξουμε τα σημεία ώστε να είναι πυκνά κατανεμημένα στα άκρα του διαστήματος $[x_0, x_n]$ και αραιά προς το κέντρο, το φαινόμενο απονεί.

Η ιδανική κατανομή σημείων που ελαχιστοποιεί το φαινόμενο Runge είναι η κατανομή Chebyshev: Τα $n + 1$ σημεία στο διάστημα $[a, b]$ είναι τα

$$x_i = \frac{b - a}{2} \cos\left(\frac{i + 0.5}{n + 1} \pi\right) + \frac{b + a}{2}, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$



Σχήμα: Κατανομή σημείων Chebyshev

Ισαπέχοντα σημεία

Πρόβλημα

Θέλουμε να επιλέξουμε $n + 1$ ισαπέχοντα σημεία, x_i , $i = 0, 1, \dots, n$, στο διάστημα $[a, b]$. Τα άκρα του διαστήματος συμπεριλαμβάνονται στα σημεία. Ποια είναι τα x_i ;

Λύση

Έστω h η απόσταση διαδοχικών σημείων. Τότε

$$\begin{aligned}x_0 &\equiv a, \\x_1 &= a + h, \\x_2 &= a + 2h, \\&\vdots \\x_n &= a + nh.\end{aligned}$$

Αλλά $x_n \equiv b$. Επομένως $a + nh = b \Rightarrow h = (b - a)/n$.

Γενικός τύπος για τα x_i :

$$x_i = a + ih.$$

Προσέξτε: $n + 1$ το πλήθος των σημείων, n το πλήθος των διαστημάτων.

Προσέγγιση με λόγο πολυωνύμων

Μια συνάρτηση $f(x)$ μπορεί να προσεγγιστεί με λόγο πολυωνύμων $R(x) = P(x)/Q(x)$ όπου

$$P(x) = a_0 + \sum_{k=1}^M a_k x^k, \quad Q(x) = b_0 + \sum_{k=1}^N b_k x^k .$$

Συνολικά έχουμε $M + N + 2$ άγνωστους συντελεστές a_k, b_k . Ένας από αυτούς μπορεί αυθαίρετα να οριστεί ίσος με 1, έστω ο b_0 . Το πλήθος των υπόλοιπων αγνώστων, $M + N + 1$, πρέπει να είναι ίσο με το πλήθος των σημείων (x_i, f_i) στα οποία γνωρίζουμε τη συνάρτηση.

Η απαίτηση να περνά η $R(x)$ από αυτά τα σημεία δίνει ένα γραμμικό σύστημα εξισώσεων

$$R(x_i) = f_i \Rightarrow P(x_i) = f_i Q(x_i), \quad i = 1, \dots, M + N + 1 ,$$

με άγνωστους τους $M + N + 1$ συντελεστές.

Παρατήρηση

Δε γνωρίζουμε πώς να επιλέξουμε τα M, N (παρά μόνο το άθροισμά τους). Κακή επιλογή αυτών θα δώσει κακή προσεγγιστική συνάρτηση.

Προσέγγιση Padé

- Εφαρμόζεται όταν θέλουμε να απλοποιήσουμε μια πολύπλοκη συνάρτηση $f(x)$.
- Απαιτούμε η $f(x)$ και η $R(x) = P(x)/Q(x)$, με $P(x)$, $Q(x)$ πολυώνυμα M και N βαθμού αντίστοιχα, να έχουν σε ένα σημείο x_0 , ίδιες τιμές και ίδιες παραγώγους μέχρι και τάξης $M + N$. Επομένως,

$$\begin{aligned}R(x_0) &= f(x_0) , \\R'(x_0) &= f'(x_0) , \\&\vdots \\R^{(M+N)}(x_0) &= f^{(M+N)}(x_0) .\end{aligned}$$

- Η λύση του μη γραμμικού συστήματος προσδιορίζει τους συντελεστές a_k , b_k (με $b_0 \equiv 1$) των $P(x)$, $Q(x)$.
- Η συνάρτηση $R(x) = P(x)/Q(x)$ είναι η *προσεγγιστική συνάρτηση του Padé*.
- Το σφάλμα της προσέγγισης, $|f(x) - R(x)|$, είναι ανάλογο του $(x - x_0)^{M+N+1}$.

Προσέγγιση κατά τμήματα με πολυώνυμα ελάχιστου βαθμού (1/2)

Στόχος

Θέλουμε να αποφύγουμε το φαινόμενο Runge (ταλαντώσεις στα άκρα του διαστήματος) κατά την προσέγγιση με πολυώνυμο παρεμβολής μεγάλου βαθμού.

Λύση

Προσεγγίζουμε την άγνωστη συνάρτηση *κατά τμήματα*, χρησιμοποιώντας πολυώνυμο πρώτου βαθμού: Χωρίζουμε το συνολικό διάστημα $[x_0, x_n]$ σε τμήματα μεταξύ διαδοχικών σημείων: $[x_0, x_1], [x_1, x_2], \dots, [x_{n-1}, x_n]$. Σε κάθε διάστημα $i = 0, 1, \dots, n - 1$, προσαρμόζουμε ένα πολυώνυμο με δύο άγνωστους συντελεστές, $p_i(x) = a_i x + b_i$, ώστε να περνάει από τα άκρα του.

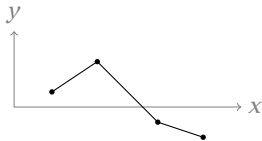
Παρατηρήσεις

Προκύπτει μια συνεχής, τμηματική προσεγγιστική συνάρτηση από ευθύγραμμα τμήματα. Όμως, οι παράγωγοι αυτής της καμπύλης είναι **ασυνεχείς** στα «εσωτερικά» σημεία x_i .

Προσέγγιση κατά τμήματα με πολυώνυμα ελάχιστου βαθμού (2/2)

Παράδειγμα

Προσέγγιση με ευθύγραμμα τμήματα



Προσέγγιση με παραβολικά τμήματα

Αντί να πάρουμε ζεύγη διαδοχικών σημείων, σχηματίζουμε τριάδες διαδοχικών σημείων: $\{x_0, x_1, x_2\}$, $\{x_2, x_3, x_4\}$, κλπ. Στην κάθε τριάδα i προσδιορίζουμε τους συντελεστές του $p_i(x) = a_i x^2 + b_i x + c_i$ ώστε να περνά από τα σημεία της. Κατασκευάζουμε έτσι τμηματική προσεγγιστική συνάρτηση με παραβολές. Είναι συνεχής με ασυνεχείς παραγώγους στα σημεία τομής.

Προσέγγιση με spline

Χαρακτηριστικά

Η καμπύλη spline είναι πολυώνυμο που

- ορίζεται τμηματικά από πολυώνυμα χαμηλού βαθμού, αλλά όχι του ελάχιστου δυνατού.
- Είναι συνεχής, με συνεχείς παραγώγους στα σημεία ένωσης των πολυωνύμων.

Πλεονεκτήματα

Η συγκεκριμένη καμπύλη

- αποφεύγει να χρησιμοποιήσει πολυώνυμα μεγάλου βαθμού (άρα το φαινόμενο Runge είναι ασήμαντο).
- είναι συνεχής και παραγωγίσιμη σε όλο το διάστημα ορισμού.

Προσέγγιση με spline

Κατασκευή φυσικής κυβικής spline (1/4)

Η «φυσική» κυβική spline είναι η συχνότερα χρησιμοποιούμενη καμπύλη. Την κατασκευάζουμε ως εξής:

- Έχουμε ένα σύνολο $n + 1$ σημείων (x_i, f_i) με $i = 0, 1, \dots, n$ και $x_i < x_{i+1}$. Ανά δύο διαδοχικά σημεία, $\{x_0, x_1\}$, $\{x_1, x_2\}$, \dots , περνούμε πολυώνυμο τρίτου βαθμού. Το κάθε πολυώνυμο $p_i(x)$ ορίζεται στο διάστημα $[x_i, x_{i+1}]$. Το πλήθος τους είναι n , όσα τα ζεύγη σημείων (ή τα διαστήματα). Επομένως $i = 0, 1, 2, \dots, n - 1$.
- Απαιτούμε για κάθε πολυώνυμο να περνά από τα άκρα του διαστήματος ορισμού του:

$$\begin{aligned}p_i(x_i) &= f_i, \\p_i(x_{i+1}) &= f_{i+1}.\end{aligned}$$

Έχουμε $2n$ γραμμικές εξισώσεις για τους συντελεστές.

Προσέγγιση με spline

Κατασκευή φυσικής κυβικής spline (2/4)

- Στα σημεία που ενώνονται τα πολυώνυμα, δηλαδή στα $n - 1$ «εσωτερικά» σημεία x_1, x_2, \dots, x_{n-1} , απαιτούμε να έχουν ίσες πρώτες και δεύτερες παραγώγους. Επομένως

$$\begin{aligned}p'_{i-1}(x_i) &= p'_i(x_i), \\p''_{i-1}(x_i) &= p''_i(x_i),\end{aligned}$$

για $i = 1, 2, \dots, n - 1$.

Αυτές είναι άλλες $2(n - 1)$ γραμμικές εξισώσεις.

- Απαιτούμε οι δεύτερες παράγωγοι του $p_0(x)$ στο άκρο x_0 και του $p_{n-1}(x)$ στο άλλο άκρο x_n να είναι ίσες με 0 («φυσική» spline):

$$\begin{aligned}p''_0(x_0) &= 0, \\p''_{n-1}(x_n) &= 0.\end{aligned}$$

Άλλες 2 γραμμικές εξισώσεις.

Γράψαμε συνολικά $2n + 2(n - 1) + 2$ γραμμικές εξισώσεις για τους $4n$ συντελεστές των πολυωνύμων.

Προσέγγιση με spline

Κατασκευή φυσικής κυβικής spline (3/4)

Αν το πολυώνυμο στο $[x_i, x_{i+1}]$, με $i = 0, \dots, n-1$ είναι της μορφής

$$p_i(x) = a_i(x - x_i)^3 + b_i(x - x_i)^2 + c_i(x - x_i) + d_i,$$

οι εξισώσεις γίνονται

$$d_i = f_i, \text{ για } i = 0, \dots, n-1,$$

$$a_i(x_{i+1} - x_i)^2 + b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i = \frac{d_{i+1} - d_i}{x_{i+1} - x_i}, \text{ για } i = 0, \dots, n-1,$$

$$3a_i(x_{i+1} - x_i)^2 + 2b_i(x_{i+1} - x_i) + c_i - c_{i+1} = 0, \text{ για } i = 0, \dots, n-2,$$

$$3a_i(x_{i+1} - x_i) + b_i - b_{i+1} = 0, \text{ για } i = 0, \dots, n-2,$$

$$b_0 = 0,$$

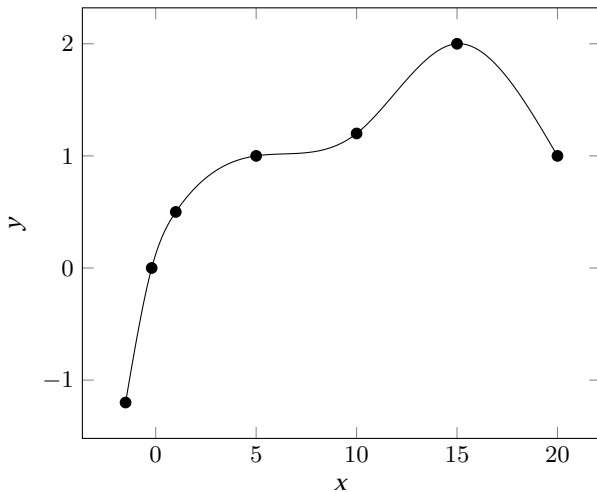
$$3a_{n-1}(x_n - x_{n-1}) + b_{n-1} = 0.$$

Η λύση του γραμμικού συστήματος υπολογίζει τους συντελεστές a_i, b_i, c_i, d_i με $i = 0, 1, \dots, n-1$.

Προσέγγιση με spline

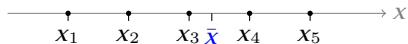
Κατασκευή φυσικής κυβικής spline (4/4)

Παράδειγμα



Άσκηση

Γνωρίζουμε να βρίσκουμε προσεγγιστική τιμή μιας συνάρτησης $f(x)$ στο σημείο \bar{x} αν γνωρίζουμε τις τιμές της σε κάποια σημεία x_i , με $i = 0, \dots, n$:



Βρείτε προσεγγιστική τιμή για τη συνάρτηση $g(x,y)$ στο σημείο (\bar{x}, \bar{y}) :

