

Numerične metode

Fizika, 1. stopnja

Vsebina predmeta

- **Uvod** (predstavitev programske opreme, aritmetika, napake)
- **Reševanje sistemov linearnih enačb** (matrične norme, Gaussova eliminacija, pivotiranje, posebni sistemi)
- **Reševanje nelinearnih enačb** (bisekcija, splošna iteracija, tangenta in sekantna metoda, sistemi nelinearnih enačb)
- **Linearni problem najmanjših kvadratov** (predoločeni sistemi, normalni sistem, ortogonalni razcep)

- **Problem lastnih vrednosti** (potenčna metoda, inverzna iteracija, QR-iteracija)
- **Interpolacija** (Lagrangeva oblika, deljene difference, Newtonova oblika interpolacijskega polinoma, numerično odvajanje)
- **Integracija** (Newton-Cotesova pravila, sestavljena pravila, Rombergova ekstrapolacija, Gaussova kvadratura pravila).
- **Reševanje navadnih diferencialnih enačb** (metode za reševanje enačb prvega reda, enočlenske metode, metode tipa Runge-Kutta, sistemi diferencialnih enačb in začetni problemi višjega reda)

Pomembnejša slovenska literatura

- B. Jurčič Zlobec in A. Berkopec: Matlab z uvodom v numerične metode,
- Z. Bohte: Numerične metode,
- Z. Bohte: Numerično reševanje sistemov linearnih enačb,
- Z. Bohte: Numerično reševanje nelinearnih enačb,
- J. W. Demmel: Uporabna numerična linearna algebra,
- E. Zakrajšek: Uvod v numerične metode,
- J. Kozak: Numerična analiza.
- B. Plestenjak: Razširjen uvod v numerične metode.

Programska oprema

- Visokonivojski programski jeziki (C++, Fortran, Java, ...): na voljo so posebne knjižnice, vendar je potrebno posebne metode implementirati.
- Programi za simbolično računanje: Mathematica, Maple, Derive,...
- Programi za numerično računanje: Matlab, Octave, Scilab, R,...

Omejili se bomo predvsem na Matlab in Octave.

Vse informacije so na voljo na naslovih

<http://www.mathworks.com>

<http://www.octave.org>

Zakaj numerično računanje?

Nekaterih problemov **ne moremo rešiti analitično!**

- Iskanje ničel polinomov stopnje 5 ali več, na primer

$$x^5 + 3x - 1 = 0.$$

- Računanje lastnih vrednosti in vektorjev matrik.
- Računanje določenega integrala, na primer

$$\int_0^1 e^{-x^2} dx.$$

- Reševanje začetnih problemov, na primer

$$y''(x) - x y(x) = 0, \quad y(0) = 1, \quad y'(0) = 0.$$

Končna aritmetika-plavajoča vejica

- Število v plavajoči vejici zapišemo kot

$$x = \pm m \cdot b^e,$$

kjer je $m = 1.c_1c_2 \dots c_t$. Pri tem je

- b : baza,
 - t : dolžina mantise,
 - e : eksponent v mejah $L \leq e \leq U$,
 - c_i : števke v mejah od 0 do $b - 1$.
- Predpostavka je, da so števila **normalizirana**: implicitna 1 na začetku mantise.
- Dovoljena so tudi **subnormalizirana** števila (vodilni bit je 0 in eksponent $L - 1$).
- Zapis označimo s $P(b, t, L, U)$.

Standard **IEEE745** predpisuje pravila za končno aritmetiko:

- Enojna natančnost: $P(2, 24, -125, 128)$.
- Dvojna natančnost: $P(2, 53, -1021, 1023)$.
- Posebna “števila”: **NAN**, $\pm\infty$.
- Številom, ki jih v izbranem sistemu $P(b, t, L, U)$ lahko predstavimo, rečemo **predstavljiva števila**.

- Za realno število x velja: če je $|x|$ med največjim in najmanjšim pozitivnim predstavljivim številom in $fl(x)$ njegovo najbližje predstavljivo število dobljeno z zaokrožanjem, je

$$fl(x) = x(1 + \delta), \quad |\delta| \leq u$$

kjer je

$$u = \frac{1}{2}b^{1-t}$$

osnovna zaokrožitvena napaka Velja:

- ▶ enojna natančnost: $u \approx 6 \cdot 10^{-8}$,
- ▶ dvojna natančnost: $u \approx 10^{-16}$.

Napake pri računanju

- Neodstranljiva napaka D_n (zaradi napake v podatkih).
- Napaka metode D_m (zaradi aproksimacije; Taylorjeva vrsta,...).
- Zaokrožitvena napaka D_z (zaradi zaokrožanja na predstavljiva števila).
- Celotna napaka $D = D_n + D_m + D_z$ (vsota prejšnjih napak).

Primer

Računamo $\sin(\pi/10)$ z osnovnimi operacijami v plavajoči vejici z desetiško bazo in dolžino mantise 4. Število $x = \pi/10$ predstavimo kot $\bar{x} = fl(x) = 0.3142$.



$$D_n = \sin(\pi/10) - \sin(0.3142) = -3.9 \cdot 10^{-5}.$$

- Namesto funkcije $\sin$ uporabimo Taylorjev polinom $g(x) = x - x^3/3$.

$$D_m = \sin(\bar{x}) - g(\bar{x}) = 2.5 \cdot 10^{-5}.$$

- Da se pokazati, da v ustreznem vrstnem redu računanja dobimo

$$D_z = 3.0 \cdot 10^{-5}.$$

- Celotna napaka je tako $D = 1.6 \cdot 10^{-5}$, torej se točna vrednost ujema s približno v tem sistemu na 4 decimalke (optimalno).

Poučni primer

Primer

Izračunali bi radi vrednost

$$e^{-x} = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^n}{n!}.$$

Vrsta teoretično konvergira za vsak $x \in \mathbb{C}$. Toda neposredno seštevanje za $x > 0$ ne da dobrih rezultatov. Kje je težava?

Vmesni členi v vsoti narastejo, končni rezultat pa je pod 1. Torej pride do napak pri računanju z velikimi členi, ki (lahko močno) vplivajo na končni rezultat.

Rešitev:

$$e^{-x} = \frac{1}{e^x} = \frac{1}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}}.$$