Επιστημονικοί Υπολογισμοί

Εισαγωγή - Βασικές έννοιες

Σταμάτιος-Άγγελος Ν. Αλεξανδρόπουλος
e-mail: stalexan@ee.duth.gr

https://www.researchgate.net/profile/Stamatios_Aggelos_Alexandropoulos
https://scholar.google.gr/citations?user=mht7W_YAAAAJ&hl=el
http://cilab.math.upatras.gr

Τμήμα Ηλεκτρολόγων Μηχανικών & Μηχανικών Υπολογιστών
Δημοκρίτειο Πανεπιστήμιο Θράκης
Κιμμέρια 67100, Ξάνθη

2 Μαρτίου 2021

ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΡΑΚΗΣ

Περιεχόμενα I

1. Εισαγωγή
   - Ιστορική αναδρομή
   - Σύγχρονες απόψεις
   - Ανάγκες - Εφαρμογές
   - Εξέλιξη των Ε.Υ.
   - Στόχος του μαθήματος
   - Θεματικές ενότητες - Σκιαγράφηση της ύλης
2. Βασικές έννοιες
   - Η έννοια του αλγεβρικού και υπερβατικού αριθμού
   - Αλγεβρικές και υπερβατικές εξισώσεις
   - Συστήματα εξισώσεων
   - Αριθμητική επίλυση συστημάτων εξισώσεων
3. Βασικά προβλήματα
   - Πρόβλημα εύρεσης ριζών
   - Πρόβλημα εύρεσης σταθερών σημείων

Περιεχόμενα II

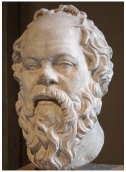
ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΡΑΚΗΣ

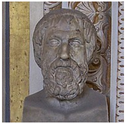
Περιεχόμενα III

Ιστορική αναδρομή

«...αν οι αριθμοί δεν είναι όμορφοι, δεν ξέρω τι είναι όμορφο...»

«...η αριθμητική οδηγεί στην αλήθεια...»





«...τα πάντα γίνονται σύμφωνα με αριθμούς...»

Ιστορική αναδρομή - Εξέλιξη








Ιστορική αναδρομή - Εξέλιξη

Προβλήματα

- Συχνά οι επιστήμονες έρχονταν σε επαφή με προβλήματα τα οποία απαιτούσαν υπερβολικό χρόνο περάτωσης.
- Οι προσεγγίσεις δεν ήταν αξιόπιστες, καθώς δεν υπήρχε η αξιοπιστία των υπολογιστικών υπολογισμών.
- Πολλές από τις αρχές των εφαρμοσμένων Επιστημών δε μπορούσαν να εφαρμοστούν, καθώς δεν είχαν εξελιχθεί ακόμα συγκεκριμένοι τομείς των Μαθηματικών.

Λύσεις

- Η δημιουργία υπολογιστικών μηχανών, ικανών να εκτελέσουν με επιτυχία πολύπλοκους και δαπανηρούς υπολογισμούς.
- Τα πραγματικά πειράματα στο εργαστήριο αντικαταστάθηκαν από προσομοιώσεις στους Η/Υ.
- Οι μετρήσεις, οι υπολογισμοί και οι παρατηρήσεις διέπονται από μεγάλη ακρίβεια.

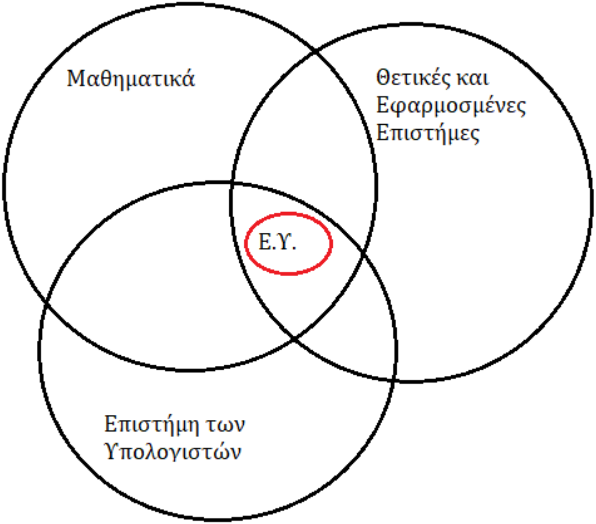
Σύγχρονες απόψεις

- Μια σχετικά νέα περιοχή, που τείνει να καθιερωθεί ως νέα επιστήμη.
- Πρόκειται για έναν κλάδο που ασχολείται με την αριθμητική επίλυση επιστημονικών προβλημάτων.
  - Ως βασικό του άξονα έχει την Αριθμητική Ανάλυση.
- Σε πολλές περιπτώσεις η Αριθμητική Ανάλυση αναφέρεται ως «Μαθηματικά των Επιστημονικών Υπολογισμών».
- Αποτέλεσμα της επεξεργασίας μεγάλης κλίμακας υπολογισμών, γεγονός που απορρέει από την αριθμητική επίλυση των επιστημονικών προβλημάτων, είναι η χρήση της λεγόμενης υπολογιστικής παραλληλίας.

Υπολογιστικά Μαθηματικά και ΕΑΑ

- Αυτό με τη σειρά του συνεπάγεται την ανάγκη για αξιόπιστες υπολογιστικές μηχανές με ισχυρή υπολογιστική ισχύ και επιπλέον, κατάλληλα μαθηματικά λογισμικά.
- Με άλλα λόγια, είναι αναγκαία η δημιουργία επιστημονικού λογισμικού, που θα επιτρέπει στον χρήστη την αριθμητική προσέγγιση αλλά και αναπαράσταση των αριθμητικών αποτελεσμάτων.
- Συμπερασματικά, θα λέγαμε πως ο τομέας των Επιστημονικών Υπολογισμών (Ε.Υ.) συντίθεται από την τομή των Μαθηματικών, της Επιστήμης των Υπολογιστών και σχεδόν σύσσωμες τις θετικές επιστήμες.

Ο χώρος «ζωής» των Ε.Υ.



Τομείς εφαρμογών - Προβλήματα

- Υπολογιστική Φυσική
- Υπολογιστική Βιολογία
- Υπολογιστική Χημεία
- Υπολογιστική Γεωλογία
- Υπολογιστικά Οικονομικά
- Μηχανική
- Αλληλεπίδραση υγρών και αερίων
- Πρόγνωση καιρού
- Πρόγνωση σεισμικής δραστηριότητας
- Πρόγνωση συμπεριφοράς χρηματιστηρίου
- Προσομοίωση αεροδιαστημικής προσεδάφισης
- κ.ά.

Η εξέλιξη του τομέα

- Η δυναμική που αποκτά ο συγκεκριμένος κλάδος φαίνεται μέσα από τη δημιουργία επιστημονικών περιοδικών με αντικείμενο τους Επιστημονικούς Υπολογισμούς (SIAM J. Scientific Computing).
- Η δημιουργία ερευνητικών ομάδων που καταπιάνονται σε σχετικά projects (Scientific Computing Laboratory (http://www.scl.rs/))
- Κάποιος που ενδιαφέρεται για τον συγκεκριμένο τομέα θα πρέπει να εντρυφήσει στις αριθμητικές ή/και παράλληλες αριθμητικές μεθόδους, σε κάποια ή κάποιες γλώσσες προγραμματισμού, αντικειμενοστραφούς ή/και παράλληλου προγραμματισμού, όπως επίσης και στον σχεδιασμό αλγορίθμων.
- Απαραίτητη είναι η εξοικείωση και εμπειρία με κάποιο επιστημονικό λογισμικό αλλά και κάποιο γραφικό πρόγραμμα, ώστε να οπτικοπούμε τα αριθμητικά αποτελέσματα.

Στόχοι

Διδακτικές και Πιστωτικές Μονάδες ECTS: Το μάθημα αντιστοιχεί σε 4 Διδακτικές Μονάδες (ΔΜ) και σε 3 Πιστωτικές Μονάδες (ΠΜ) ECTS (European Credit Transfer and Accumulation System—ECTS). Συγκεκριμένα:

(α) Ως μάθημα επιλογής του τμήματος Η. Μ. & Μ. Υ. (μάθημα 4ου εξαμήνου - Εαρινό) θα πρέπει να προσφέρει στους ενδιαφερόμενους φοιτητές τη χρησιμότητα ή/και την αναγκαιότητα των Επιστημονικών Υπολογισμών (ΕΥ) στο χώρο της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.

- Πιο συγκεκριμένα, να παρουσιάσει τις τομές των Μαθηματικών με τομείς των θετικών επιστημών, στοχεύοντας στις λύσεις που παρέχουν οι Επιστημονικοί Υπολογισμοί.

Στόχοι

(β) Ο εκπαιδευόμενος φοιτητής θα πρέπει να κατανοήσει τις θεωρητικές έννοιες, που αφορούν άμεσες και επαναληπτικές μεθόδους επίλυσης εξισώσεων και μερικών διαφορικών εξισώσεων.

- Βασικός σκοπός είναι η εμπέδωση εννοιών και μεθόδων, που ανήκουν στο χώρο των πεπερασμένων διαφορών και επαναληπτικών διαδικασιών. Ο φοιτητής καλείται να αποκτήσει βασικές γνώσεις για τις μεθόδους που ανήκουν στο χώρο της αριθμητικής γραμμικής άλγεβρας.

(γ) Τέλος, αφού έχουν αφομοιωθεί οι έννοιες που αναγράφονται στο (β), ο φοιτητής θα πρέπει να υλοποιήσει και να εφαρμόσει τις μεθόδους και τεχνικές που αναλύθηκαν στο πρώτο μέρος της ύλης χρησιμοποιώντας τη γλώσσα προγραμματισμού Fortran και το μαθηματικό λογισμικό MATLAB/Mathematica.

Θεματικές ενότητες

Οι θεματικές ενότητες στις οποίες δύναται να χωριστεί η παράδοση του μαθήματος είναι οι παρακάτω:

(α) Εισαγωγικές έννοιες: Θα παρουσιάσουμε την αναγκαιότητα των Επιστημονικών Υπολογισμών σε διάφορους τομείς της επιστήμης και της τεχνολογίας. Επιπλέον, θα παραθέσουμε βασικές έννοιες της αριθμητικής ανάλυσης και έννοιες που είναι απαραίτητες για την ερμηνεία της συμπεριφοράς αριθμητικών μεθόδων.

Θεματικές ενότητες

(β) Αμεσες και επαναληπτικές μέθοδοι: Σκοπός αυτής της ενότητας είναι η παρουσίαση αριθμητικών μεθόδων για την επίλυση γραμμικών και μη-γραμμικών αλγεβρικών ή/και υπερβατικών εξισώσεων. Θα μελετήσουμε αριθμητικές μεθόδους για την προσέγγιση των λύσεων συναρτήσεων πολλών μεταβλητών.

Θεματικές ενότητες

(γ) Μερικές διαφορικές εξισώσεις: Στην ενότητα αυτή θα μελετηθούν θεμελιώδεις αριθμητικές μέθοδοι για διάφορες μερικές διαφορικές εξισώσεις, υπερβολικής, ελλειπτικής και παραβολικής μορφής. Αυτές οι τεχνικές περιλαμβάνουν μεθόδους πεπερασμένων διαφορών, φασματικές μεθόδους, μεθόδους βελτιστοποίησης κ.ά.

Θεματικές ενότητες

(δ) **Αριθμητικές μέθοδοι γραμμικής άλγεβρας:** Αυτή η θεματική ενότητα στοχεύει στην Αριθμητική επίλυση γραμμικών συστημάτων, όπως και στον Αριθμητικό υπολογισμό ιδιοτιμών και ιδιοδιανυσμάτων.

Θεματικές ενότητες

(ε) Αριθμητικές μέθοδοι βελτιστοποίησης: Στόχος της συγκεκριμένης θεματικής ενότητας είναι η μελέτη των βασικών εννοιών της μαθηματικής βελτιστοποίησης και της παρουσίασης καθιερωμένων μεθόδων ελαχιστοποίησης αντικειμενικών συναρτήσεων χωρίς περιορισμούς.

Θεματικές ενότητες

(στ) Fortran-MATLAB/Mathematica: Σκοπός αυτής της θεματικής ενότητας είναι να παρουσιάσει τους άξονες που είναι απαραίτητοι, ώστε ο φοιτητής να είναι σε θέση να υλοποιήσει τις μεθόδους και τεχνικές που αναφέρονται παραπάνω. Κατόπιν, ο φοιτητής θα πρέπει να είναι σε θέση να εφαρμόσει τις υλοποιημένες μεθόδους σε διαφορετικά προβλήματα.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Ως πολυώνυμο βαθμού ν ορίζεται η έκφραση:

$$P_\nu(x) = \alpha_\nu x^\nu + \alpha_{\nu-1} x^{\nu-1} + \cdots + \alpha_1 x + \alpha_0, \tag{1}$$

με α_i, $i = 0, 1, 2, \ldots, \nu$ πραγματικούς ή φανταστικούς συντελεστές και $\nu \in \mathbb{Z}^+ \cup \{0\}$.

Ορισμός

Ανάλογα με το βαθμό του πολυωνύμου, δηλαδή εάν $\nu = 1, 2, 3, \ldots$, το πολυώνυμο καλείται γραμμικό, τετραγωνικό, κυβικό κ.ο.κ.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Αλγεβρικός αριθμός θα καλείται ο αριθμός k, που αποτελεί ρίζα ενός πολυωνύμου της μορφής (1) με συντελεστές ακέραιους ή ρητούς αριθμούς. Ο βαθμός ν του πολυωνύμου, του οποίου ο αλγεβρικός αποτελεί ρίζα, θα καλείται βαθμός του αλγεβρικού αριθμού k.

Παράδειγμα

Ο αριθμός $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$ είναι αλγεβρικός αριθμός βαθμού δύο.

Σημείωση

Αρκεί να δείξουμε ότι ο αριθμός $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$ αποτελεί ρίζα ενός πολυωνύμου με ρητούς συντελεστές βαθμού δύο και επιπλέον, δε μπορεί να αποτελέσει ρίζα πολυωνύμου μικρότερου βαθμού.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Ο αριθμός $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$ είναι αλγεβρικός αριθμός βαθμού δύο.

Λύση: Ο αριθμός $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$ αποτελεί ρίζα της εξίσωσης $x^2 - x - 1 = 0$, η οποία είναι μια πολυωνυμική εξίσωση με ακέραιους συντελεστές. Επιπλέον, εκφράζει την ελαχιστοτική εξίσωση[1] του αριθμού $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$. Αυτό συμβαίνει καθώς ο αριθμός $\frac{\sqrt{5}+1}{2}$, ως άρρητος, δε μπορεί να γραφεί ως κλάσμα ακεραίων και συνεπώς, δε δύναται να αποτελέσει ρίζα κάποιας πολυωνυμικής εξίσωσης μικρότερου βαθμού του δύο, δηλαδή της μορφής $\alpha_1 x + \alpha_0 = 0$, με ακέραιους ή ρητούς συντελεστές.

[1] Ελαχιστοτική εξίσωση ενός αλγεβρικούς αριθμού, καλείται μια εξίσωση της μορφής $P_\nu(x) = 0$, εάν ο αλγεβρικός αριθμός δε μπορεί να αποτελέσει ρίζα μιας εξίσωσης της παραπάνω μορφής με μικρότερο βαθμό.

Ερώτημα

Ερώτηση 1

Ο αριθμός $\frac{2}{3}$ είναι αλγεβρικός αριθμός;

Ερώτηση 2

Ο μιγαδικός αριθμός i είναι αλγεβρικός αριθμός;

Προσπαθήστε να απαντήσετε τα παραπάνω ερωτήματα αξιοποιώντας τις πληροφορίες που δίνονται στους παραπάνω ορισμούς.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Καλούμε υπερβατικό αριθμό[2] έναν πραγματικό αριθμό r, ο οποίος δε μπορεί να αποτελέσει ρίζα κανενός πολυωνύμου με συντελεστές ακέραιους ή ρητούς.

[2] Ο όρος αποδίδεται στον Γερμανό μαθηματικό Gottfried Wilhelm Leibniz, ο οποίος ενέμπνευσε τον, επίσης, Γερμανό μαθηματικό Georg Cantor, ο οποίος το 1874 έδωσε μια επαναστατική απόδειξη ύπαρξης αυτών των αριθμών.

Βασικές έννοιες

Θεώρημα (Hermite - Lindemann - Weierstrass)

Έστω $k \neq 0$ ένας αλγεβρικός αριθμός. Τότε ο αριθμός e^k είναι υπερβατικός αριθμός[3].

Παράδειγμα

Ο γνωστός αριθμός π είναι υπερβατικός αριθμός.

Σημείωση

Θα τεκμηριώσουμε τον παραπάνω ισχυρισμό με τη βοήθεια του θεωρήματος των Hermite - Lindemann - Weierstrass.

[3] Η απόδειξη του παραπάνω θεωρήματος δε θα μας απασχολήσει στο συγκεκριμένο μάθημα και γι΄ αυτό παραλείπεται.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Ο γνωστός αριθμός π είναι υπερβατικός αριθμός.

Λύση: Έστω ότι ο αριθμός π είναι αλγεβρικός αριθμός. Θα καταλήξουμε σε άτοπο.

Σύμφωνα με το Θεώρημα των Hermite - Lindemann - Weierstrass ο αριθμός $e^{i\pi}$ είναι υπερβατικός, καθώς το γινόμενο $i\pi$ είναι ένας μη μηδενικός αλγεβρικός αριθμός, αφού από την υπόθεση ο αριθμός π είναι αλγεβρικός και επίσης, ο αριθμός i αποδεικνύεται ότι είναι αλγεβρικός αριθμός (βαθμού δύο - βλέπε ορισμό αλγεβρικού αριθμού).

Συνεπώς, και το γινόμενο αυτών των δύο θα είναι αλγεβρικός αριθμός (καθώς το σύνολο των αλγεβρικών αριθμών αποτελεί σώμα). Όμως, από τη γνωστή ταυτότητα του Euler:

Παράδειγμα (συνέχεια)

$$e^{i\pi} + 1 = 0, \tag{2}$$

ισχύει ότι $e^{i\pi} = -1$, ο οποίος όμως, είναι αλγεβρικός αριθμός. Άρα, καταλήγουμε σε άτοπο. Οπότε η αρχική υπόθεση ότι ο αριθμός π είναι αλγεβρικός δεν είναι αληθής. Συμπερασματικά, ο αριθμός π είναι υπερβατικός.

Ερώτημα 3

Ο αριθμός $e^{\sqrt{2}}$ είναι αλγεβρικός ή υπερβατικός αριθμός;

Ερώτημα 4

Ο αριθμός $\ln 2$ είναι αλγεβρικός ή υπερβατικός αριθμός;

Προσπαθήστε να απαντήσετε τα παραπάνω ερωτήματα αξιοποιώντας τις πληροφορίες που δίνονται από το Θεώρημα των Hermite - Lindemann - Weierstrass.

Γνωστοί υπερβατικοί αριθμοί

- Ο γνωστός αριθμός e του Euler.
- Ο γνωστός αριθμός π.
- Η γνωστή σταθερά e^{π} του Gelfond.
- Οι τριγωνοετρικοί αριθμοί $sinx$, $cosx$, $tanx$, $cotx$, $secx$ και $cscx$, με x ένα μη μηδενικό αλγεβρικό αριθμό.
- $\ln x$, με $x \neq 0, 1$ αλγεβρικό αριθμό.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Θα καλούμε αλγεβρική εξίσωση κάθε εξίσωση της μορφής

$$P(x) = Q(x),$$

με $P(x),\ Q(x)$ πολυώνυμα.

Παράδειγμα

Η εξίσωση

$$6x^5 - x^3 + 2x^2 - 1 = 0$$

είναι μια αλγεβρική εξίσωση βαθμού 5, μίας μεταβλητής. Η επίλυσή της σηματοδοτεί την εύρεση ενός x που την επαληθεύει.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Θα καλούμε αλγεβρική συνάρτηση κάθε συνάρτηση που επαληθεύει μια αλγεβρική εξίσωση που έχει συντελεστές πολυώνυμα με ρητούς συντελεστές. Έτσι, θα καλούμε αλγεβρική μια συνάρτηση της μορφής

$$y = f(x)$$

εάν επαληθεύει μια εξίσωση της μορφής:

$$\alpha_n(x)y^n + \alpha_{n-1}(x)y^{n-1} + \cdots + \alpha_0(x) = 0,$$

με τους συντελεστές να είναι πολυώνυμα του x.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Η συνάρτηση

$$y = \frac{x-1}{2x^2+3x+2}$$

είναι αλγεβρική συνάρτηση, αφού ικανοποιεί την αλγεβρική εξίσωση:

$$(2x^2+3x+2)y + (1-x) = 0,$$

με

$$P(x) = 2x^2+3x+2$$

και

$$Q(x) = 1-x.$$

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Αν μια συνάρτηση δεν επαληθεύει καμία αλγεβρική εξίσωση της οποίας οι συντελεστές είναι πολυώνυμα, τότε θα καλείται υπερβατική συνάρτηση.

Παράδειγμα

Όλες οι τριγωνομετρικές, λογαριθμικές και εκθετικές συναρτήσεις αποτελούν παραδείγματα υπερβατικών συναρτήσεων.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Μια εξίσωση θα καλείται υπερβατική εάν δεν περιέχει μόνο αλγεβρικές εκφράσεις των μεταβλητών της αλλά και υπερβατικές.

Παράδειγμα

Η εξίσωση

$$e^{x_1} + cos x_1 x_2 - \frac{2}{3} x_1^3 = 0$$

είναι μια υπερβατική εξίσωση δύο μεταβλητών.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Ένα σύνολο από αλγεβρικές εξισώσεις με ίδιο σύνολο μεταβλητών καλείται σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων. Όταν το σύνολο των εξισώσεων αποτελείται από υπερβατικές εξισώσεις, τότε το σύστημα θα καλείται υπερβατικό.

Ορισμός

Θα καλούμε λύση ενός συστήματος αλγεβρικών ή/και υπερβατικών εξισώσεων το πλήθος των μεταβλητών που επαληθεύουν όλες τις εξισώσεις του εκάστοτε συστήματος.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Το σύνολο των επόμενων δύο αλγεβρικών εξισώσεων

$$f_1(x_1,x_2) = 2x_1x_2^2 - 2 = 0$$
$$f_2(x_1,x_2) = 3x_1^3x_2^2 - \frac{2}{3}x_1 - 1 = 0$$

αποτελεί ένα σύστημα αλγεβρικών εξισώσεων.

Παράδειγμα

Το σύνολο των επόμενων δύο υπερβατικών εξισώσεων

$$f_1(x_1,x_2) = e_1^x x_2^2 - 2\ln x_1 = 0$$
$$f_2(x_1,x_2) = \cos x_1 - x_2^2 - 1 = 0$$

αποτελεί ένα σύστημα υπερβατικών εξισώσεων.

Επισήμανση

Προσοχή

Το πρόβλημα της Αριθμητικής Επίλυσης μη-γραμμικών αλγεβρικών ή/και υπερβατικών εξισώσεων είναι ένα από τα δυσκολότερα προβλήματα που συναντώνται στα μαθηματικά.

Επισήμανση

Προσοχή

Το πρόβλημα της Αριθμητικής Επίλυσης μη-γραμμικών αλγεβρικών ή/και υπερβατικών εξισώσεων είναι ένα από τα δυσκολότερα προβλήματα που συναντώνται στα μαθηματικά.

- Συναντάται σε πάρα πολλούς τομείς της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.

Επισήμανση

Προσοχή

Το πρόβλημα της Αριθμητικής Επίλυσης μη-γραμμικών αλγεβρικών ή/και υπερβατικών εξισώσεων είναι ένα από τα δυσκολότερα προβλήματα που συναντώνται στα μαθηματικά.

- Συναντάται σε πάρα πολλούς τομείς της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.
- Δύναται να συνδεθεί με πολλά και δύσκολα προβλήματα

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Δοθείσης μιας συνάρτησης $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, αναζητούμε ένα σημείο $x^* \in (a, b)$ για το οποίο ισχύει $f(x^*) = 0$.

Ορισμός

Το σημείο $x^* \in \mathbb{R}$ στην παραπάνω περίπτωση καλείται ρίζα ή μηδενικό της συνάρτησης f ή λύση της εξίσωσης $f(x) = 0$.

Παράδειγμα

Έστω η συνάρτηση $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, με τύπο

$$f(x) = \sin x.$$

Να βρείτε κάποιο $x^* \in (0, 4)$ για το οποίο να ισχύει $f(x^*) = 0$.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Δοθείσης μιας συνάρτησης $F_n = (f_1, f_2, \ldots, f_n) : \mathcal{A}_n \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, αναζητούμε ένα σημείο $x^* \in \mathcal{A}_n$ για το οποίο ισχύει $F_n(x^*) = \mathcal{O}_n$.

Ορισμός

Το σημείο $x^* \in \mathcal{A}_n$ στην παραπάνω περίπτωση καλείται ρίζα ή μηδενικό της συνάρτησης F_n ή λύση της εξίσωσης $F_n(x) = \mathcal{O}_n$.

Παράδειγμα

Έστω η συνάρτηση $F_2 : \mathcal{A}_2 \subset \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$, με τύπο

$$F_2(x) = \begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 1 \\ f_2(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 + 2 \end{cases} .$$

Να βρείτε κάποιο $x^* = (x_1^*, x_2^*) \in \mathcal{A}_2$ για το οποίο να ισχύει $F_2(x^*) = \mathcal{O}_2 = (0, 0)^\top$.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Δοθείσης μιας συνάρτησης $f : [a, b] \subset \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, αναζητούμε ένα σημείο $x^* \in (a, b)$ για το οποίο ισχύει $f(x^*) = x^*$.

Ορισμός

Το σημείο $x^* \in \mathbb{R}$ στην παραπάνω περίπτωση καλείται σταθερό σημείο της συνάρτησης f.

Παράδειγμα

Έστω η συνάρτηση $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, με τύπο

$$f(x) = \frac{1}{3}x^2 + \frac{1}{3}x - 1.$$

Να βρείτε κάποιο $x^* \in \mathbb{R}$ για το οποίο να ισχύει $f(x^*) = x^*$.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Δοθείσης μιας συνάρτησης $F_n = (f_1, f_2, \ldots, f_n) : \mathcal{A}_n \subset \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$, αναζητούμε ένα σημείο $x^* \in \mathcal{A}_n$ για το οποίο ισχύει $F_n(x^*) = x^*$.

Ορισμός

Το σημείο $x^* \in \mathcal{A}_n$ στην παραπάνω περίπτωση καλείται σταθερό σημείο της F_n.

Παράδειγμα

Έστω η συνάρτηση $F_2 : \mathcal{A}_2 \subset \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}^2$, με τύπο

$$F_2(x) = \begin{cases} f_1(x_1, x_2) = -\frac{1}{4}x_1^2 - \frac{1}{2}x_1x_2 - \frac{1}{4}x_2^2 + 1 \\ f_2(x_1, x_2) = -\frac{1}{2}x_1^2 - x_1x_2 - \frac{1}{2}x_2^2 + 1 \end{cases} .$$

Να βρείτε κάποιο $x^* = (x_1^*, x_2^*) \in \mathcal{A}_2$ για το οποίο να ισχύει $F_2(x^*) = x^*$.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Δοθείσης μιας συνάρτησης $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, αναζητούμε ένα σημείο $x^* \in \mathbb{R}$ για το οποίο ισχύει $f(x^*) \leq f(x)$ $\forall x \in \mathbb{R}$.

Ορισμός

Το σημείο $x^* \in \mathbb{R}$ στην παραπάνω περίπτωση καλείται ελαχιστοποιητής της συνάρτησης f και η τιμή $f(x^*)$ καλείται ελάχιστο της συνάρτησης.

Παράδειγμα

Έστω η συνάρτηση $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$, με τύπο

$$f(x) = x^2 - 1.$$

Να βρείτε κάποιο $x^* \in \mathbb{R}$ για το οποίο να ισχύει $f(x^*) \leq f(x)$.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Δοθείσης μιας συνάρτησης $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, αναζητούμε ένα σημείο $x^* \in \mathbb{R}^n$ για το οποίο ισχύει $f(x^*) \leq f(x)\ \forall x \in \mathbb{R}^n$.

Ορισμός

Το σημείο $x^* \in \mathbb{R}^n$ στην παραπάνω περίπτωση καλείται ελαχιστοποιητής της συνάρτησης f και η τιμή $f(x^*)$ καλείται ελάχιστο της συνάρτησης.

Παράδειγμα

Έστω η συνάρτηση $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, με τύπο

$$f(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2.$$

Να βρείτε κάποιο $x^* \in \mathbb{R}^2$ για το οποίο να ισχύει $f(x^*) \leq f(x)$.

Μια ευρύτερη συζήτηση

- Έρχεται να δώσει λύση σε προβλήματα που δεν επιδέχονται λύσης μέσω κλειστού μαθηματικού τύπου (θεωρητικά μαθηματικά).
- Παρέχει τη δυνότητα επιλογής μιας κατάλληλης μεθόδου για την προσέγγιση ενός προβλήματος.
- Καταλληλότητα: Όταν το αποτέλεσμα που επιστρέφει είναι ακριβές και βέβαιο και επιπλέον, «απαιτεί» το μικρότερο υπολογιστικό κόστος σε συνδυασμό με τους υπόλοιπους πόρους (π.χ. χώρο αποθήκευσης στη μνήμη).

Μια ευρύτερη συζήτηση

- Έρχεται να δώσει λύση σε προβλήματα που δεν επιδέχονται λύσης μέσω κλειστού μαθηματικού τύπου (θεωρητικά μαθηματικά).
- Παρέχει τη δυνότητα επιλογής μιας κατάλληλης μεθόδου για την προσέγγιση ενός προβλήματος.
- Καταλληλότητα: Όταν το αποτέλεσμα που επιστρέφει είναι ακριβές και βέβαιο και επιπλέον, «απαιτεί» το μικρότερο υπολογιστικό κόστος σε συνδυασμό με τους υπόλοιπους πόρους (π.χ. χώρο αποθήκευσης στη μνήμη).

Δύο άξονες

- Θεωρητικός άξονας: Πώς θα παραχθούν οι κατάλληλες αυτές μέθοδοι για την επίλυση ενός προβλήματος...
- Εφαρμοσμένος άξονας: Πώς θα υλοποιηθούν οι παραπάνω μέθοδοι, ώστε να αξιοποιηθούν από έναν Η/Υ...

Μια ευρύτερη συζήτηση

- Ο τομέας των Επιστημονικών Υπολογισμών είναι συνυφασμένος με τη δημιουργία κατάλληλων μεθόδων, δηλαδή ενός Αλγορίθμου.
- Αλγόρίθμος: Θεωρούμε ότι έχει κάποια συγκεκριμένα χαρακτηριστικά:
  1. Πεπερασμένο πλήθος εντολών
  2. Ένα συγκεκριμένο πλήθος δεδομένων εισόδου.
  3. Ένα σύνολο παραμέτρων εξόδου.
  4. Κάθε εντολή στο κυρίως σώμα του αλγορίθμου έχει μια επόμενη.

Βασικές έννοιες - Εισαγωγικά

Για κάθε μια από τις αριθμητικές μεθόδους που θα εξετάσουμε πρέπει να λάβουμε υπόψιν μας μια σειρά παραγόντων, όπως οι ακόλουθοι:

1. Πολυπλοκότητα: υπολογιστική, μνήμης, υλοποίησης
2. Σύγκλιση: για τις επαναληπτικές διαδικασίες (ναι, όχι, τοπικά, ολικά κ.λπ.)
3. Ακρίβεια: πόσο ακριβές είναι το αποτέλεσμα που παρέχει
4. Σφάλματα: ποια η ανθεκτικότητά της σε αριθμητικά σφάλματα (αναπαράσταση δεδομένων, πράξεων κ.λπ.)

ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΡΑΚΗΣ

Σφάλματα

Οι πραγματικοί αριθμοί δύνανται να αναπαρασταθούν σε έναν Η/Υ με ένα πεπερασμένο πλήθος ψηφίων.

Επιπλέον, κατά την αριθμητική επίλυση χρησιμοποιούμε πεπερασμένες αριθμητικές μεθόδους (αλγορίθμους) $\Rightarrow$ προσεγγιστικές λύσεις με μια δεδομένη ακρίβεια.

Ακόμα, σε πολλά προβλήματα τα δεδομένα που εισέρχονται προς επεξεργασία περιέχουν σφάλματα, καθώς είναι απόρροια μετρήσεων ή/και παρατηρήσεων $\Rightarrow$ επηρεάζει την ακρίβεια.

Τέλος, τα είδη των σφαλμάτων στους υπολογισμούς ποικίλουν και δύνανται να επηρεάσουν την ακρίβεια του τελικού αποτελέσματος μιας αριθμητικής μεθόδου.

Σφάλματα

Προσοχή

Για τους παραπάνω λόγους η επιλογή της αριθμητικής μεθόδου οφείλει να γίνεται μετά από μελέτη, ώστε τελικά, να οδηγηθούμε στην καταλληλότερη μέθοδο που μειώνει ή μπορεί να αποφύγει σφάλματα.

Σφάλματα

Προσοχή

Για τους παραπάνω λόγους η επιλογή της αριθμητικής μεθόδου οφείλει να γίνεται μετά από μελέτη, ώστε τελικά, να οδηγηθούμε στην καταλληλότερη μέθοδο που μειώνει ή μπορεί να αποφύγει σφάλματα.

Γενικά

Υπάρχουν και περιπτώσεις που οποιαδήποτε μέθοδο κι αν επιλέξουμε δε γίνεται να αποφύγουμε τα σφάλματα στους υπολογισμούς, καθώς υπάρχουν σφάλματα που είναι σύμφυτα με το πρόβλημα $\Rightarrow$ ειδικές τεχνικές αντιμετώπισης σφαλμάτων.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Κάθε αριθμός, έστω α, δύναται να παρασταθεί μονοσήμαντα σε ένα αριθμητικό σύστημα με βάση $\beta \geq 2$, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\alpha = \pm \sum_{i=n}^{-\infty} c_i \beta^i,$$

με τους συντελεστές c_i να είναι στοιχεία από το σύνολο:

$$C = \{0, 1, 2, 3, \ldots, \beta - 1\},$$

και καλούνται ψηφία του α.

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Κάθε αριθμός, έστω α, δύναται να παρασταθεί μονοσήμαντα σε ένα αριθμητικό σύστημα με βάση $\beta \geq 2$, σύμφωνα με τη σχέση:

$$\alpha = \pm \sum_{i=n}^{-\infty} c_i \beta^i,$$

με τους συντελεστές c_i να είναι στοιχεία από το σύνολο:

$$C = \{0, 1, 2, 3, \ldots, \beta - 1\},$$

και καλούνται ψηφία του α.

Συμβολικά: Ο παραπάνω αριθμός αναπαρίσταται ως ακολούθως:

$$\alpha = c_n c_{n-1} \cdots c_0 \,.\, c_{-1} c_{-2} \cdots \,, \quad \text{για} \quad n \geq 0 \quad \text{και} \quad c_n \neq 0 \quad \text{ή}$$

$$\alpha = .000 \cdots c_n c_{n-1} c_{n-2} \cdots \,, \quad \text{για} \quad n < 0$$

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Ανάλογα με την τιμή που παίρνει η βάση β, καθορίζεται και το αριθμητικό σύστημα. Έτσι, αν $\beta = 2$ το αριθμητικό σύστημα λέγεται δυαδικό, αν αν $\beta = 3$ το αριθμητικό σύστημα λέγεται τριαδικό κ.ο.κ.

Ορισμός

Θα λέμε ότι ένας αριθμός έχει πεπερασμένη αναπαράσταση, αν $\exists k \in \mathbb{Z}, \quad k \leq n$, τέτοιος ώστε:

$$c_i = 0, \quad \forall i = k, k-1, k-2, \ldots$$

Ορισμός

Σε κάθε αριθμό θα καλούμε ως σημαντικά ψηφία όλα τα ψηφία του, πέραν των μηδενικών ψηφίων που βρίσκονται στην αρχή του αριθμού.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Πόσα σημαντικά ψηφία εντοπίζονται στους παρακάτω αριθμούς:

1. 0.00234
2. 234.5
3. 3.14
4. 0.0000087632

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Πόσα σημαντικά ψηφία εντοπίζονται στους παρακάτω αριθμούς:

1. 0.00234
2. 234.5
3. 3.14
4. 0.0000087632

Απάντηση:

1. Ο αριθμός 0.0024 έχει 2 σημαντικά ψηφία
2. Ο αριθμός 234.5 έχει 4 σημαντικά ψηφία
3. Ο αριθμός 3.14 έχει 3 σημαντικά ψηφία
4. Ο αριθμός 0.0000087632 έχει 5 σημαντικά ψηφία

Βασικοί κανόνες

- Σε κάθε αριθμητικό σύστημα η βάση είναι κατά ένα μεγαλύτερη από το μεγαλύτερο ψηφίο του συστήματος.
- Όταν πολλαπλασιάζουμε ή διαιρούμε με τη βάση του συστήματος, μεταθέτουμε αντιστοίχως δεξιά ή αριστερά την υποδιαστολή.
- Όταν η βάση του αριθμητικού συστήματος είναι μεγαλύτερη του δέκα, χρησιμοποούμε τα γράμματα A, B, C κ.ο.κ.
- Είθισται να τοποθετούμε ως υποδείκτη σε έναν αριθμό τη βάση του αριθμητικού συστήματος, ώστε να τον ξεχωρίζουμε και να μην υπάρχει σύγχυση μεταξύ διαφορετικών αριθμών από διαφορετικά αριθμητικά συστήματα.
- Έστω $\beta_1 < \beta_2$ δύο αριθμητικές βάσεις. Τότε, ο αριθμός των σημαντικών ψηφίων που απαιτούνται για την αναπαράσταση ενός ακεραίου από το ένα σύστημα αρίθμησης στο άλλο είναι μεγαλύτερος ή ίσος.

Παραδείγματα

Παράδειγμα

Να αναπαρασταθούν οι παρακάτω αριθμοί, στο δεκαδικό σύστημα αρίθμησης:

(α) 10001.1_2

(β) 16.02_8

(γ) $F211BA_{16}$

Λύση:

(α) $(10001.1)_2 = (1\times2^4)+(0\times2^3)+(0\times2^2)+(0\times2^1)+(1\times2^0)+(1\times2^{-1}) = (17.5)_{10}$

(β) $(16.02)_8 = (1\times8^1)+(6\times8^0)+(0\times8^{-1})+(2\times8^{-2}) = (14.03125)_{10}$

(γ) $(F211BA)_{16} = (15\times16^5)+(2\times16^4)+(1\times16^3)+(1\times16^2)+(11\times16^1)+(10\times16^0) = (15864250)_{10}$

Αναπαράσταση ακέραιου μέρους

Έστω, ένας αριθμός που ανήκει στο δεκαδικό σύστημα αρίθμησης και θέλουμε να τον αναπαραστήσουμε σε ένα άλλο αριθμητικό σύστημα.

Χρησιμοποιούμε, τα ακέραια υπόλοιπα που προκύπτουν μετά από διαδοχικές διαιρέσεις του αριθμού αυτού με τη βάση αρίθμησης του συστήματος στο οποίο θέλουμε να κάνουμε την αναπαράσταση.

Συγκεκριμένα, ορίζουμε μια επαναληπτική διαδικασία για τον υπολογισμό των ψηφίων c_i ενός αριθμού α, στο σύστημα αρίθμησης με βάση τη β, για $i = 0, 1, 2, \ldots, n$.

Δίνουμε την παραπάνω επαναληπτική διαδικασία με τη βοήθεια ενός παραδείγματος το οποίο ακολουθεί.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Να αναπαρασταθεί ο αριθμός 339_{10} *στο δυαδικό σύστημα αρίθμησης.*

Λύση:

$$
\begin{array}{ccccccccc}
i & \alpha_i & & \beta & & \alpha_{i+1} & & c_i \\
0 & 339 & : & 2 & = & 169 & + & 1 \\
1 & 169 & : & 2 & = & 84 & + & 1 \\
2 & 84 & : & 2 & = & 42 & + & 0 \\
3 & 42 & : & 2 & = & 21 & + & 0 \\
4 & 21 & : & 2 & = & 10 & + & 1 \\
5 & 10 & : & 2 & = & 5 & + & 0 \\
6 & 5 & : & 2 & = & 2 & + & 1 \\
7 & 2 & : & 2 & = & 1 & + & 0 \\
8 & 1 & : & 2 & = & 0 & + & 1
\end{array}
$$

$$339_{10} = 101010011_2$$

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Να αναπαρασταθεί ο αριθμός 339_{10} στο δεκαεξαδικό σύστημα αρίθμησης.

Λύση:

i	α_i		β		α_{i+1}		c_i
0	339	:	16	=	21	+	3
1	21	:	16	=	1	+	5
2	1	:	16	=	0	+	1

$$339_{10} = 153_{16}$$

Αναπαράσταση δεκαδικού μέρους

Έστω, ένας δεκαδικός αριθμός που ανήκει στο δεκαδικό σύστημα αρίθμησης και θέλουμε να τον αναπαραστήσουμε σε ένα άλλο αριθμητικό σύστημα.

Χρησιμοποιούμε, τα ακέραια μέρη που προκύπτουν μετά από διαδοχικούς πολλαπλασιαμούς του αριθμού αυτού με τη βάση αρίθμησης του συστήματος στο οποίο θέλουμε να κάνουμε την αναπαράσταση.

Συγκεκριμένα, ορίζουμε μια επαναληπτική διαδικασία για τον υπολογισμό των ψηφίων c_{-i} ενός αριθμού α, στο σύστημα αρίθμησης με βάση τη β, για $i = 0, 1, 2, \ldots, n$.

Δίνουμε την παραπάνω επαναληπτική διαδικασία με τη βοήθεια ενός παραδείγματος το οποίο ακολουθεί.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Να αναπαρασταθεί ο αριθμός 0.375_{10} *στο δυαδικό σύστημα αρίθμησης.*

Λύση:

i	α_{-i}		β		α_{-i-1}		c_{-i}
1	0.375	$\times$	2	$=$	0.75	$+$	0
2	0.75	$\times$	2	$=$	0.5	$+$	1
3	0.5	$\times$	2	$=$	0.0	$+$	1

$$0.375_{10} = 0.011_2$$

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Να αναπαρασταθεί ο αριθμός 0.5625_{10} *στο οκταδικό σύστημα αρίθμησης.*

Λύση:

$$
\begin{array}{cccccccccc}
i & \alpha_{-i} & & \beta & & \alpha_{-i-1} & & c_{-i} & \\
1 & 0.5625 & \times & 8 & = & 0.5 & + & 4 & \quad 0.5625_{10} = 0.44_8 \\
2 & 0.5 & \times & 8 & = & 0.0 & + & 4 &
\end{array}
$$

Προσοχή: Υπάρχουν αριθμοί για τους οποίους δε μπορούμε να έχουμε πεπερασμένη αναπαράσταση παρά μόνο προσεγγίσεις, οι οποίες γίνονται πιο ακριβείς όσο αυξάνεται ο χώρος αποθήκευσης.

Αναπαράσταση κινητής υποδιαστολής

Προκειμένου να μειώσουμε το χώρο αποθήκευσης χρησιμοποιούμε εκθετική μορφή.

Ας υποθέσουμε ότι μας δίνεται ένας αριθμός που απαιτεί μεγάλο χώρο αποθήκευσης, π.χ. $0.000000000000000339_{10}$

Σε περιπτώσεις όπως η παραπάνω, ο χώρος αποθήκευσης θα καταλαμβανόταν από τα μηδενικά, ενώ τα σημαντικά ψηφία του αριθμού δε θα αποθηκεύονταν.

Λύση: Να γράψουμε τον αριθμό σε εκθετική μορφή ως εξής:

$$0.339 \times 10^{-16} \text{ ή } 339 \times 10^{-18}$$

(αναπαράσταση κινητής υποδιαστολής)

Σφάλμα και Διόρθωση

Ορισμός

Θα καλούμε ως σφάλμα τη διαφορά της πραγματικής τιμής ενός αριθμού από την προσεγγιστική του τιμή. Συνήθως, συμβολίζουμε ως x την πραγματική τιμή ενός αριθμού, ενώ ως x^* την αντίστοιχη προσεγγιστική τιμή. Συνεπώς, ορίζουμε ως σφάλμα

$$\epsilon = x^* - x.$$

Αντίστοιχα, ως διόρθωση r καλούμε την αντίθετη ποσότητα, δηλαδή

$$r = x - x^*.$$

Απόλυτο σφάλμα και σχετικό σφάλμα

Ορισμός

Θα καλούμε ως απόλυτο σφάλμα την απόλυτη τιμή του σφάλματος, δηλαδή

$$|\epsilon| = |x^* - x|.$$

Ως σχετικό σφάλμα ϵ_σ καλούμε το πηλίκο του σφάλματος προς τον αριθμό x, δηλαδή

$$\epsilon_\sigma = \frac{\epsilon}{x} = \frac{x^* - x}{x} \cong \frac{x^* - x}{x^*}.$$

Αντίστοιχα, το απόλυτο σχετικό σφάλμα, ορίζεται ως εξής:

$$|\epsilon_\sigma| = |\frac{\epsilon}{x}| = |\frac{x^* - x}{x}| \cong |\frac{x^* - x}{x^*}|.$$

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Έστω ότι η πραγματική τιμή ενός αριθμού είναι $x = 3.0$, ενώ η προσεγγιστική τιμή που δίνει μια αριθμητική μέθοδος είναι $x^* = 2.999$. Να υπολογιστεί το σφάλμα, το απόλυτο σφάλμα, το σχετικό σφάλμα και το απόλυτο σχετικό σφάλμα του αριθμού x.

Λύση: Σύμφωνα με τους ορισμούς που παρατέθηκαν παραπάνω, έχουμε:

σφάλμα $\epsilon = x^* - x = 2.999 - 3.000 = -0.001$

απόλυτο σφάλμα: $\mid \epsilon \mid = |x^* - x| = |2.999 - 3.000| = |-0.001| = 0.001$

σχετικό σφάλμα: $\epsilon_\sigma = \dfrac{\epsilon}{x} = \dfrac{-0.001}{3.000} = -0.0003$

απόλυτο σχετικό σφάλμα: $\mid \epsilon_\sigma \mid = \left|\dfrac{\epsilon}{x}\right| = \left|\dfrac{-0.001}{3.000}\right| = 0.0003$

ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΡΑΚΗΣ

Γενικά

Σημείωση

Συνήθως, το απόλυτο σφάλμα προτιμάται στις περιπτώσεις πρόσθεσης και αφαίρεσης, ενώ αντίθετα το σχετικό σφάλμα είναι πιο χρήσιμο σε περιπτώσεις όπου πολλαπλασιάζουμε ή διαιρούμε.

Συμπέρασμα

Κάθε σφάλμα μπορεί να φανεί χρήσιμο για διαφορετικές περιπτώσεις. Έτσι, στην περίπτωση όπου χρησιμοποιούμε το σχετικό σφάλμα θα πρέπει να αναλογιστούμε το μέγεθος της ποσότητας που μετράμε, αντίθετα με την περίπτωση του απόλυτου σφάλματος.

Πηγές και είδη

Τα σφάλματα στα αριθμητικά αποτελέσματα μπορεί να οφείλονται σε πολλές και ποικίλες πηγές:

1. Αρχικά σφάλματα: Προέρχονται συνήθως από λάθη σε μετρήσεις ή σε δεδομένα που καταγράφονται κατόπιν παρατηρήσεων.
2. Σφάλμα του μαθηματικού προβλήματος: Η φύση αυτών των σφαλμάτων οφείλεται σε μετατροπές ή μετασχηματισμούς του αρχικού προβλήματος και μπορεί να έγιναν απολοποιήσεις ή να υπήρξαν παραλήψεις σε παραμέτρους. (συμβάσεις)
3. Ειδικά προβλήματα: Υπάρχουν προβλήματα που παρουσιάζουν τεράστια «ευαισθησία» σε μικρές αλλαγές.
4. Εμφυτα σφάλματα: Πρόκειται για σφάλματα που «ζουν» εξαρχής σε κάποια προβλήματα (χαοτικά μοντέλα).

Περιγραφή

Ορισμός

Όταν υποθέτουμε ότι η αριθμητική μέθοδος που χρησιμοποιούμε παρέχει αποτελέσματα αριθμητικών πράξεων που είναι ακριβείς, τότε προκύπτει το λεγόμενο σφάλμα αποκοπής (σφάλμα που οφείλεται στη μέθοδο υπολογισμού).

Εναλλακτικά: Πρόκειται για το σφάλμα που εμφανίζεται όταν αντί για μια αναλυτική διαδικασία υπολογισμού, εφαρμόσουμε μια προσεγγιστική.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Χαρακτηριστικό παράδειγμα αποτελεί ο υπολογισμός μιας απειροσειράς:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots$$

Περιγραφή

Ορισμός

Το σφάλμα που προκύπτει από την ανάγκη αναπαράστασης πεπερασμένου πλήθους ψηφίων καλείται σφάλμα στρογγυλοποίησης.

Διαδικασία

1. Στη στρογγυλοποίηση ενός αριθμού σε s δεκαδικά ψηφία, παραλείπουμε τα ψηφία από την $s+1$ θέση και μετά.
2. Το ψηφίο που εντοπίζεται στην s θέση το αφήνουμε όπως είναι ή το αυξάνουμε κατά μια μονάδα, αν το μέρος που παραλείπεται είναι μεγαλύτερο από μισή μονάδα της s δεκαδικής τάξης.
3. Εάν το μέρος που παραλείπεται είναι ακριβώς μισή μονάδα της s δεκαδικής τάξεως, τότε, αν το s ψηφίο είναι άρτιο, το αφήνουμε ως έχει, διαφορετικά το αυξάνουμε κατά 1.

Παράδειγμα

Παράδειγμα

Να στρογγυλοποιήσετε τον αριθμό 3.1415926535 *σε 8, 7, 6, 5, 4 και 3 δεκαδικά ψηφία αντίστοιχα.*

Λύση:

$$
\begin{aligned}
3.1415926535 &= 3.14159265 && \text{στρογγυλοποίηση σε 8 δ.ψ.}\\
&= 3.1415926 && \text{στρογγυλοποίηση σε 7 δ.ψ.}\\
&= 3.141593 && \text{στρογγυλοποίηση σε 6 δ.ψ.}\\
&= 3.14159 && \text{στρογγυλοποίηση σε 5 δ.ψ.}\\
&= 3.1416 && \text{στρογγυλοποίηση σε 4 δ.ψ.}\\
&= 3.142 && \text{στρογγυλοποίηση σε 3 δ.ψ.}
\end{aligned}
$$

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Κατά τη στρογγυλοποίηση ενός δεκαδικού αριθμού σε s δεκαδικά ψηφία, για το απόλυτα σφάλμα στρογγυλοποίησης ισχύει:

$$|\epsilon| = |x^* - x| \leq \frac{1}{2}10^{-s}$$

Παράδειγμα

Να υπολογίσετε το απόλυτο σφάλμα στρογγυλοποίησης του δεκαδικού αριθμού $x = 0.339$, σε $s = 2$ δεκαδικά ψηφία.

Λύση:

$|\epsilon| = |x^* - x| = |0.34 - 0.339| = |0.001| = 0.001 \leq 0.005 = \frac{1}{2}10^{-2}$

Παράδειγμα

Επισήμανση

Η στρογγυλοποίηση ενός αριθμού σε έναν αριθμό δεκαδικών ψηφίων δύναται να διαφέρει από τη στρογγυλοποίηση αυτού του αριθμού στον ίδιο αριθμό σημαντικών ψηφίων.

Παράδειγμα

Δίνεται ο αριθμός $x = 0.00339$. να στρογγυλοποιήσετε τον αριθμό αυτό σε 3 δεκαδικά ψηφία και ακολούθως σε 3 σημαντικά ψηφία.

Λύση:

$$\begin{aligned} 0.00339 &= 0.003 && \text{στρογγυλοποίηση σε 3 δ.ψ.} \\ &= 0.00339 && \text{στρογγυλοποίηση σε 3 σ.ψ.} \end{aligned}$$

Βασικοί ορισμοί

Ορισμός

Θα λέμε ότι οι αριθμοί x και x^* συμφωνούν σε s δεκαδικά ψηφία, αν ισχύει:

$$|x^* - x| \leq \frac{1}{2}10^{-s}$$

Παράδειγμα

Να υπολογίσετε σε πόσα δεκαδικά ψηφία συμφωνούν οι αριθμοί $x = 0.007349$ *και* $x^* = 0.006457$.

Λύση:

$|\epsilon| = |x^* - x| = |0.006457 - 0.007349| = | - 0.000892| = 0.000892 \leq 0.005 = \frac{1}{2}10^{-2}$. Άρα συμφωνούν σε 2 δ.ψ.

Συμπερασματικά...

1. Η ύπαρξη σφαλμάτων κάνει τα αποτελέσματα μη ακριβή.

Συμπερασματικά...

1. Η ύπαρξη σφαλμάτων κάνει τα αποτελέσματα μη ακριβή.
2. Απαιτείται προσεκτική διαχείριση, ώστε τα σφάλματα να εξαλείφονται ή έστω να μειώνονται.

Συμπερασματικά...

1. Η ύπαρξη σφαλμάτων κάνει τα αποτελέσματα μη ακριβή.
2. Απαιτείται προσεκτική διαχείριση, ώστε τα σφάλματα να εξαλείφονται ή έστω να μειώνονται.
3. Η εκτίμηση των σφαλμάτων παίζει καθοριστικό ρόλο στον προσδιορισμό της καταλληλότητας ή/και σθεναρότητας των αριθμητικών μεθόδων.

Συμπερασματικά...

1. Η ύπαρξη σφαλμάτων κάνει τα αποτελέσματα μη ακριβή.
2. Απαιτείται προσεκτική διαχείριση, ώστε τα σφάλματα να εξαλείφονται ή έστω να μειώνονται.
3. Η εκτίμηση των σφαλμάτων παίζει καθοριστικό ρόλο στον προσδιορισμό της καταλληλότητας ή/και σθεναρότητας των αριθμητικών μεθόδων.
4. Οι πηγές και τα είδη σφαλμάτων μπορεί να διαφέρουν από πρόβλημα σε πρόβλημα.

Συμπερασματικά...

1. Η ύπαρξη σφαλμάτων κάνει τα αποτελέσματα μη ακριβή.
2. Απαιτείται προσεκτική διαχείριση, ώστε τα σφάλματα να εξαλείφονται ή έστω να μειώνονται.
3. Η εκτίμηση των σφαλμάτων παίζει καθοριστικό ρόλο στον προσδιορισμό της καταλληλότητας ή/και σθεναρότητας των αριθμητικών μεθόδων.
4. Οι πηγές και τα είδη σφαλμάτων μπορεί να διαφέρουν από πρόβλημα σε πρόβλημα.
5. Είναι κάτι που στην πλειοψηφία των περιπτώσεων δε δύναται να αποφύγουμε, λόγω της φύσης των προβλημάτων ή/και των προσεγγιστικών υπολογισμών.

Ποια η σημασία της?

- Η διαμέριση ενός αρχικού προβλήματος σε μικρότερα (δυνητικά απλούστερα) προβλήματα καλείται συχνά ως παράλληλη επεξεργασία.
- Τα επί μέρους προβλήματα επιλύονται ξεχωριστά από διαφορετικούς επεξεργαστές.
- Για να επιτευχθεί μια παράλληλη διαχείριση χρειαζόμαστε κατάλληλους αλγορίθμους, τους λεγόμενους παράλληλους αλγορίθμους.
- Βασική διάκριση ανάμεσα στους αλγορίθμους είναι οι σειριακοί και οι παράλληλοι.

Παράλληλη επεξεργασία

Νόμος του Moore

Το πλήθος των transistors ανά τετραγωνικό εκατοστό σε ένα ολοκληρωμένο κύκλωμα διπλασιάζεται κάθε 18 μήνες.

Πρακτικά...

Μεταφράζεται σε αύξηση της υπολογιστικής ισχύς ενός επεξεργαστή κάθε 18 μήνες.

Είναι η παράλληλη επεξεργασία αναγκαία?

- Όπως αναφέραμε και στην εισαγωγή, τα προβλήματα που αντιμετωπίζουμε είναι όλο και πιο σύνθετα.
- Πολλά από τα προβλήματα αυτά διαχειρίζονται τεράστιο όγκο προβλημάτων, είναι μεγάλης κλίμακας και απαιτούν υπολογιστικές προσομοιώσεις.
- Το παραπάνω μας οδηγεί σε αναγκαία αύξηση της υπολογιστικής ισχύς.
- Moore: Δηλώνει ότι η αύξηση που περιγράφει ο νόμος του δε μπορεί να συνεχίζεται επ΄ αόριστον.
- Συμπερασματικά: Είναι απαρίτητη η ανάθεση μικρότερων projects σε πολλούς, διαφορετικούς επεξεργαστές, δηλαδή οι παράλληλοι υπολογισμοί.

Εφικτοί στόχοι

- Η ανάπτυξη μεγαλύτερης υπολογιστικής ισχύς μέσω της χρήσης περισσότερων επεξεργαστών.
- Ανάπτυξη κατάλληλων, αποδοτικών και «ευφυών» παράλληλων αλγορίθμων.
- Βέλτιση διαμέριση και κατανομή των διεργασιών ώστε:
  - να έχουμε κατά το δυνατόν λιγότερα υποπροβλήματα
  - να έχουμε την καλύτερη δυνατή επικοινωνία, και συνεπώς, αλληλεπίδραση μεταξύ των επεξεργαστών
  - να υπάρχει συνεργασία σε διαφορετικά υπολογιστικά συστήματα

Πρακτικά...

- Επιτυγχάνεται η επίλυση ενός προβλήματος σε συντομότερο χρόνο.
- Προσεγγίζονται προβλήματα μεγάλης κλίμακας που απαιτούν τεράστιους υπολογιστικούς πόρους (μνήμη).
- Μας βοηθά στην επίλυση προβλημάτων που δεν επιλύονται από έναν και μοναδικό επεξεργαστή.
- Πολλές φορές υπάρχει δυκολία στην κατασκευή ενός κατάλληλου παράλληλου αλγορίθμου.
- Κατ΄ επέκταση η κατασκευή παράλληλων υπολογιστικών μηχανών δεν είναι εύκολη και επιπλέον, είναι αρκετά κοστοβόρα.
- Συχνά η απαιτούμενη αλληλεπίδραση μεταξύ των διαφορετικών επεξεργαστών μπορεί να «σκοτώσει» το πρόγραμμα.

Υλοποίηση

Η υλοποίηση των αριθμητικών μεθόδων (Αλγόριθμοι) δύναται να γίνει αξιοποιώντας είτε κάποια γλώσσα προγραμματισμού είτε κάποιο μαθηματικό λογισμικό:

- Fortran
- Python
- MATLAB
- Mathematica
- Maple

Βιβλιοθήκες

- Association for Computing Machinery (ACM)
- Engineering and Scientific Subroutine Library (ESSL)
- International Mathematical Software Library (IMSL)
- Numerical Algorithms Group (NAG)

Συμπερασματικά...

1. Η εξέλιξη των Υπολογιστικών Μαθηματικών και της Αριθμητικής Ανάλυσης έδωσε πολλές λύσεις σε δύσκολα προβλήματα της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.

Συμπερασματικά...

1. Η εξέλιξη των Υπολογιστικών Μαθηματικών και της Αριθμητικής Ανάλυσης έδωσε πολλές λύσεις σε δύσκολα προβλήματα της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.
2. Η ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων παρείχε αξιόπιστες προσεγγίσεις σε προβλήματα που δεν επιδέχονται λύση μέσω κλειστού μαθηματικού τύπου (αναλυτικά).

Συμπερασματικά...

1. Η εξέλιξη των Υπολογιστικών Μαθηματικών και της Αριθμητικής Ανάλυσης έδωσε πολλές λύσεις σε δύσκολα προβλήματα της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.
2. Η ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων παρείχε αξιόπιστες προσεγγίσεις σε προβλήματα που δεν επιδέχονται λύση μέσω κλειστού μαθηματικού τύπου (αναλυτικά).
3. Η υλικοτεχνική πρόοδος και η εξέλιξη των Η/Υ έδωσε τη δυνατότητα για την παραγωγή υπολογιστικά προηγμένων μηχανημάτων υψηλής απόδοσης.

Συμπερασματικά...

1. Η εξέλιξη των Υπολογιστικών Μαθηματικών και της Αριθμητικής Ανάλυσης έδωσε πολλές λύσεις σε δύσκολα προβλήματα της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.
2. Η ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων παρείχε αξιόπιστες προσεγγίσεις σε προβλήματα που δεν επιδέχονται λύση μέσω κλειστού μαθηματικού τύπου (αναλυτικά).
3. Η υλικοτεχνική πρόοδος και η εξέλιξη των Η/Υ έδωσε τη δυνατότητα για την παραγωγή υπολογιστικά προηγμένων μηχανημάτων υψηλής απόδοσης.
4. Η πληθώρα των υπολογιστικών εργαλείων δίνει τη δυνατότητα σε μη έμπειρους χρήστες να υλοποιήσουν αριθμητικές μεθόδους.

Συμπερασματικά...

1. Η εξέλιξη των Υπολογιστικών Μαθηματικών και της Αριθμητικής Ανάλυσης έδωσε πολλές λύσεις σε δύσκολα προβλήματα της Επιστήμης και της Τεχνολογίας.
2. Η ανάπτυξη αριθμητικών μεθόδων παρείχε αξιόπιστες προσεγγίσεις σε προβλήματα που δεν επιδέχονται λύση μέσω κλειστού μαθηματικού τύπου (αναλυτικά).
3. Η υλικοτεχνική πρόοδος και η εξέλιξη των Η/Υ έδωσε τη δυνατότητα για την παραγωγή υπολογιστικά προηγμένων μηχανημάτων υψηλής απόδοσης.
4. Η πληθώρα των υπολογιστικών εργαλείων δίνει τη δυνατότητα σε μη έμπειρους χρήστες να υλοποιήσουν αριθμητικές μεθόδους.
5. Ο συνδυασμός και οι τομές με ποικίλα επιστημονικά πεδία καθιστούν τις τεχνικές των Επιστημονικών Υπολογισμών αναγκαίες.

Βιβλιογραφία - Αναφορές

- Γραββάνης Γ., Επιστημονικοί υπολογισμοί: Υπολογιστικές μέθοδοι και μαθηματικό λογισμικό, Παπασωτηρίου, 2013.
- Ακρίβης Γ.Δ., Δουγάλης Β.Α., Εισαγωγή στην αριθμητική ανάλυση, Πανεπιστημιακές εκδόσεις Κρήτης, Ηράκλειο, 1997.
- Βραχάτης Μ.Ν., Αριθμητική ανάλυση: Εισαγωγή, Εκδόσεις Κλειδάριθμος, Αθήνα, 2011.
- Βραχάτης Μ.Ν., Αριθμητική Ανάλυση: Υπερβατικές Εξισώσεις, Εκδόσεις Κλειδάριθμος, Αθήνα, 2012.
- Νικόλαος Μισυρλής. Αριθμητική Ανάλυση: Μια Αλγοριθμική Προσέγγιση. Εκδόσεις: Εκδοτική ΕΚΠΑ 2017. Εύδοξος Αριθμητική Ανάλυση

Βιβλιογραφία - Αναφορές

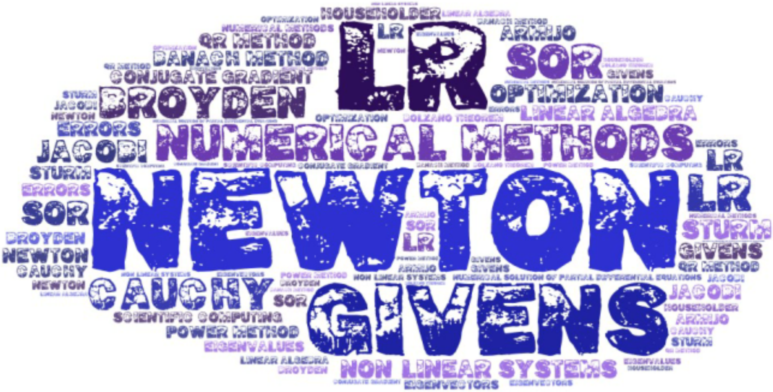
- Gerald, Curtis F, Applied numerical analysis. Pearson Education India, 2004.
- Atkinson, Kendall E, An introduction to numerical analysis. John wiley & sons, 2008.
- Burden, Richard L and Faires, J Douglas, Numerical Analysis, Brooks, Cole, Belmont, CA, 1997.
- Phillips, George M and Taylor, Peter J, Theory and applications of numerical analysis. Elsevier, 1996.
- Davis, Philip J and Rabinowitz, Philip, Methods of numerical integration. Courier Corporation, 2007.

ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΡΑΚΗΣ

Βιβλιογραφία - Αναφορές

- Herniter, Marc E, Programming in MATLAB. Brooks/Cole Publishing Co., 2000.
- Wolfram, Stephen and others, The MATHEMATICA® book, version 4. Cambridge university press, 1999.
- Gene H. Golub, Charles F. Van Loan, Θεωρία και Υπολογισμοί Μητρώων, Εκδόσεις Πεδίο, 2015.
- Λ. Trefethen, D. Bau, Numerical Linear Algebra, SIAM 1997.
- Β. Δουγαλής, Δ. Νούτσος, Α. Χατζηδήμος, Αριθμητική Γραμμική Άλγεβρα, Πανεπιστημιακές σημειώσεις, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων.

Σας ευχαριστώ πολύ για την προσοχή σας!



ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ
ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ
ΘΡΑΚΗΣ