Utrecht, 11 november 2014

Numerieke Wiskunde

Gerard Sleijpen

Universiteit Utrecht
Department of Mathematics

http://www.staff.science.uu.nl/∼sleij101/

Gerard Sleijpen
Kamer 504, Freudenthal Gebouw
Tel: 030-2531732
G.L.G.Sleijpen@uu.nl

Felix Beckebanze
Emile Broeders
Jan-Willem Buurlage

http://www.staff.science.uu.nl/∼sleij101/

> Lectures > Numerieke Wiskunde, Theoretisch deel

Voor cursusmateriaal (matlab code),
achtergrondmateriaal,

Samenvatting

Een numeriek **wiskundige** is een wiskundige
die **algoritmes** ontwerpt
om problemen uit de wetenschap en techniek
efficiënt, **betrouwbaar** en **nauwkeurig numeriek**
op te lossen.

Een numeriek wiskundige is een **strateeg**.

Programma

- Numeriek
- Algoritme
- Nauwkeurig
- Strateeg
- Betrouwbaar
- Efficiënt
- Problemen uit wetenschap en techniek
- Waarom Numerieke Wiskunde
- Doel van de Cursus
- Theoretisch deel, praktisch deel
- Organisatie

Numeriek en analytisch

numeriek of getalsmatig
maar ook grafisch, animaties

Wiskundige argumenten bevatten gewoonlijk zowel numerieke als analytische aspecten.

Voorbeeld. Schets de grafiek van $f(x) = \frac{x^2-1}{x^2-2}$.

Algoritme

Algoritme *(rekenschema): Algoritme is een verbastering van al-Khwarizmi, de naam van een Perzische astronoom en wiskundige uit de 9de eeuw.*

Voorbeeld. Bereken f' in het punt x.

- Kies een $h > 0$.
- Bereken $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$

Hoe groot moet h gekozen?
Hoe nauwkeurig moet het antwoord?

Nauwkeurigheid

fout $\equiv$ ware waarde - verkregen waarde

Voorbeeld. $f'(x) - \frac{f(x+h)-f(x)}{h} = -\frac{1}{2}hf''(\xi)$
voor zekere ξ tussen x en $x+h$

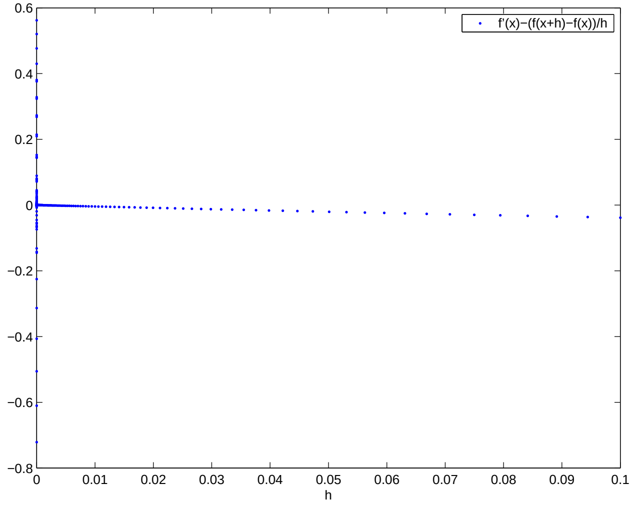
Getallenvoorbeeld. $f(x) = x\sin(x)$. Bereken $f'(\frac{\pi}{4})$.

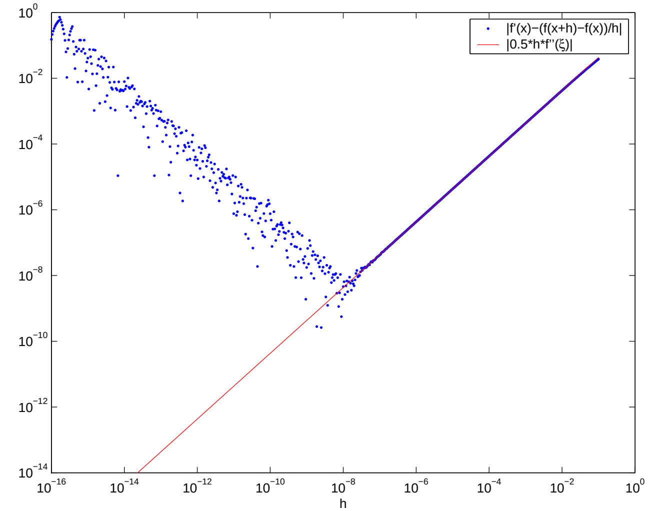
Analytisch: $f'(x) = \sin(x) + x\cos(x)$. $\quad (*)$

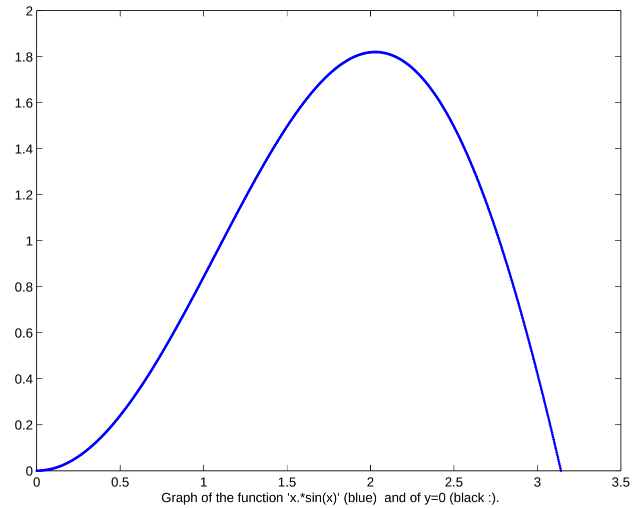
Numeriek: $D_h f(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$. $\quad (**)$

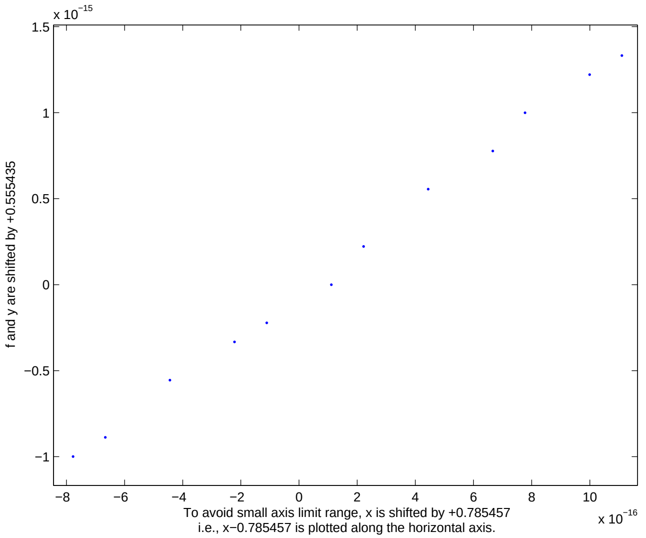
$f''(x) = 2\cos(x) - x\sin(x)$, $\quad |f''(\xi)| \le 2$, $\quad |-\frac{1}{2}hf''(\xi)| \le h$.

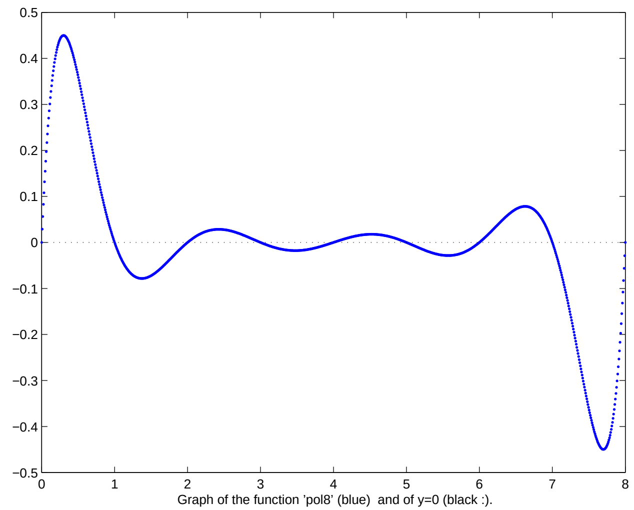
```
Met h=1.00e-003 is f'(x)-Df(x) = -4.289804e-004
Met h=1.00e-006 is f'(x)-Df(x) = -4.294664e-007
Met h=1.00e-009 is f'(x)-Df(x) = +1.762046e-008
Met h=1.00e-012 is f'(x)-Df(x) = +3.254716e-005
Met h=1.00e-015 is f'(x)-Df(x) = +4.122182e-002
```

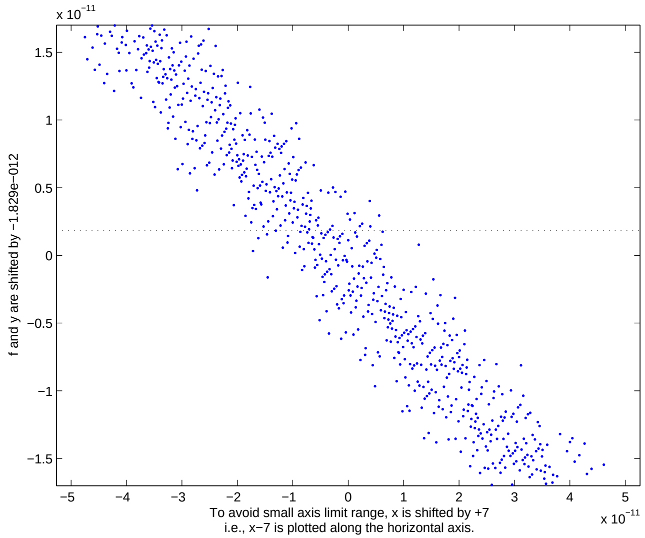



|f'(x)−(f(x+h)−f(x))/h|
|0.5*h*f''(ξ)|
h


Graph of the function 'x.*sin(x)' (blue) and of y=0 (black :).


x 10^−15
f and y are shifted by +0.555435
To avoid small axis limit range, x is shifted by +0.785457
i.e., x−0.785457 is plotted along the horizontal axis.
x 10^−16


Graph of the function 'pol8' (blue) and of y=0 (black :).



De computer rekent met een beperkt (16) aantal decimalen. Dit leidt tot afrondfouten.

Conclusie. Fout heeft twee componenten:

1) **Benaderingsfout**, ook wel **approximatiefout**:
   fout door een wiskundige benaderingsformule te gebruiken

2) **Evaluatiefout**:
   het effect van afrondfouten

Voorbeeld. α, $\alpha^\star$ exacte, resp., berekende grootheid,
Zij $f^\star(x+h)$ de berekende functie waarde $f(x+h)$.
Dan $|f(x+h) - f^\star(x+h)| \leq \epsilon$ zekere $\epsilon > 0$.
$\epsilon = 1.3\,10^{-16}$ in geval $f(x) = x\sin(x)$
$\epsilon \approx 10^{-11}$ in geval f 8ste graads polynoom

Opmerking. Bovengrens ϵ kan geschat worden.
Verder **geen** structuur in de evaluatie-fout!

De computer rekent met een beperkt (16) aantal decimalen. Dit leidt tot afrondfouten.

Conclusie. Fout heeft twee componenten:

1) **Benaderingsfout**, ook wel **approximatiefout**:
   fout door een wiskundige benaderingsformule te gebruiken

2) **Evaluatiefout**:
   het effect van afrondfouten

Voorbeeld. $|f(x+h) - f^\star(x+h)| \leq \epsilon$

Evaluatiefout: $D_h f(x) - D_h^\star f(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f^\star(x+h)-f^\star(x)}{h}$

$$|D_h f(x) - D_h^\star f(x)| \leq \frac{2\epsilon}{h}$$

$\epsilon = 1.3\,10^{-16}$, $h = 10^{-12}$, dan $|\text{evaluatie-fout}| \leq 2.6\,10^{-4}$

De computer rekent met een beperkt (16) aantal decimalen. Dit leidt tot afrondfouten.

Conclusie. Fout heeft twee componenten:

1) **Benaderingsfout**, ook wel **approximatiefout**:
   fout door een wiskundige benaderingsformule te gebruiken

2) **Evaluatiefout**:
   het effect van afrondfouten

Voorbeeld. $|f(x+h) - f^\star(x+h)| \leq \epsilon$

Evaluatiefout: $D_h f(x) - D_h^\star f(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f^\star(x+h)-f^\star(x)}{h}$

$$|D_h f(x) - D_h^\star f(x)| \leq \frac{2\epsilon}{h}$$

Opmerking. Schatting is **scherp**, d.w.z., $=$ komt voor.
We hebben geen praktische manier om een betere schatting te krijgen.

De computer rekent met een beperkt (16) aantal decimalen. Dit leidt tot afrondfouten.

Conclusie. Fout heeft twee componenten:

1) **Benaderingsfout**, ook wel **approximatiefout**:
   fout door een wiskundige benaderingsformule te gebruiken

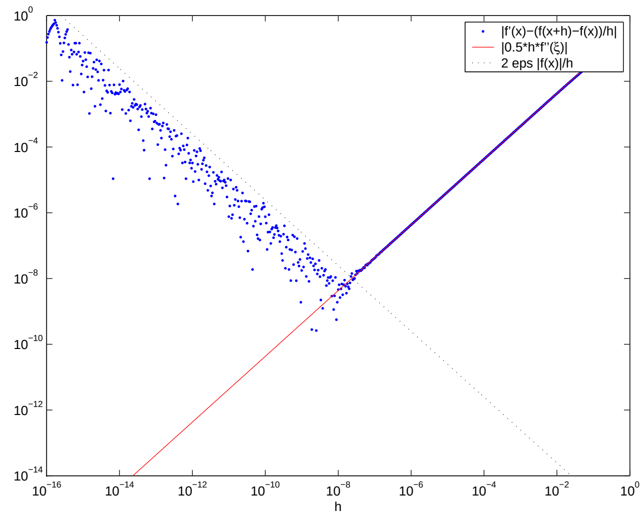
2) **Evaluatiefout**:
   het effect van afrondfouten

Voorbeeld. $|f(x+h) - f^\star(x+h)| \leq \epsilon$

Evaluatiefout: $D_h f(x) - D_h^\star f(x) = \frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f^\star(x+h)-f^\star(x)}{h}$

$$|D_h f(x) - D_h^\star f(x)| \leq \frac{2\epsilon}{h}$$

Opmerking. Voor $h \to 0$ geldt: evaluatie-fout $\to \infty$
Numeriek differentiëren is **instabiel**:
kleine fouten kunnen een groot effect hebben



De computer rekent met een beperkt (16) aantal decimalen. Dit leidt tot afrondfouten.

Conclusie. Fout heeft twee componenten:

1) **Benaderingsfout**, ook wel **approximatiefout**:
   fout door een wiskundige benaderingsformule te gebruiken

2) **Evaluatiefout**:
   het effect van afrondfouten

$$\text{Fout} = \text{approximatiefout} + \text{evaluatie-fout}$$

$$f'(x) - D_h f^\star(x) = [f'(x) - D_h f(x)] + [D_h f(x) - D_h^\star f(x)]$$

Approximatiefout **heeft structuur** $= -\frac{1}{2} h f''(\xi) \approx \frac{1}{2} h f''(x)$

Evaluatiefout heeft **schatbare bovengrens**, $\leq \frac{2\epsilon}{h}$
verder **geen** bruikbare structuur

$$f'(x) \approx D_h^\star f(x) \qquad\qquad c \equiv -\tfrac{1}{2} f''(x)$$

Hoe kiezen we h?

1) **Als schattingen voor ϵ en $|c| = |\frac{1}{2} f''(x)|$ beschikbaar zijn.**

Bepaal $h = h_{\text{best}}$ die $\frac{\epsilon}{h} + |c| h$ minimaliseert:

$0 = -\frac{\epsilon}{h_{\text{best}}^2} + |c| \quad \Rightarrow$

$$\frac{\epsilon}{h_{\text{best}}} = |c|\, h_{\text{best}}, \qquad h_{\text{best}} = \sqrt{\frac{\epsilon}{|c|}}, \qquad \frac{\epsilon}{h_{\text{best}}} + |c|\, h_{\text{best}} = 2\sqrt{\epsilon\, |c|}$$

$f'(x) \approx D_h^\star f(x)$ $\qquad$ $c \equiv -\frac{1}{2} f''(x)$

Hoe kiezen we h?

1) **Als schattingen voor ϵ en $|c| = |\frac{1}{2} f''(x)|$ beschikbaar zijn.**

$$\frac{\epsilon}{h_{\text{best}}} = |c|\, h_{\text{best}}, \qquad h_{\text{best}} = \sqrt{\frac{\epsilon}{|c|}}, \qquad \frac{\epsilon}{h_{\text{best}}} + |c|\, h_{\text{best}} = 2\sqrt{\epsilon\, |c|}$$

Hoe nauwkeurig moeten die schattingen zijn?

Vaak voldoende als

de fout in een of twee cijfers bekend is.

$f'(x) \approx D_h^\star f(x)$ $\qquad$ $c \equiv -\frac{1}{2} f''(x)$

Hoe kiezen we h?

1) **Als schattingen voor ϵ en $|c| = |\frac{1}{2} f''(x)|$ beschikbaar zijn.**

2) **Anders.**

Uit grafiek leren we dat

fout $\approx ch$ **als** $h > h_{\text{best}}$

Strategie: kies h_0
bereken $D_{h_0}^\star f(x)$, $D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x)$

Als $h_0 \gg h_{\text{best}}$ dan $\text{fout}_{\frac{1}{2}h_0} \approx D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x) - D_{h_0}^\star f(x)$

Hoe weet je of $h_0 \gg h_{\text{best}}$?

$f'(x) \approx D_h^\star f(x)$ $\qquad$ $c \equiv -\frac{1}{2} f''(x)$

Hoe kiezen we h?

1) **Als schattingen voor ϵ en $|c| = |\frac{1}{2} f''(x)|$ beschikbaar zijn.**

2) **Anders.**

Uit grafiek leren we dat

fout $\approx ch$ **als** $h > h_{\text{best}}$

Strategie: kies h_0
bereken $D_{h_0}^\star f(x)$, $D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x)$, $D_{\frac{1}{4}h_0}^\star f(x)$

Als $h_0 \gg h_{\text{best}}$,

dan $[D_{\frac{1}{4}h_0}^\star f(x) - D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x)] \approx \frac{1}{2}[D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x) - D_{h_0}^\star f(x)]$

$f'(x) \approx D_h^\star f(x)$ $\qquad$ $c \equiv -\frac{1}{2} f''(x)$

Hoe kiezen we h?

1) **Als schattingen voor ϵ en $|c| = |\frac{1}{2} f''(x)|$ beschikbaar zijn.**

2) **Anders.**

Uit grafiek leren we dat

fout $\approx ch$ **als** $h > h_{\text{best}}$

Strategie: kies h_0
bereken $D_{h_0}^\star f(x)$, $D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x)$, $D_{\frac{1}{4}h_0}^\star f(x)$

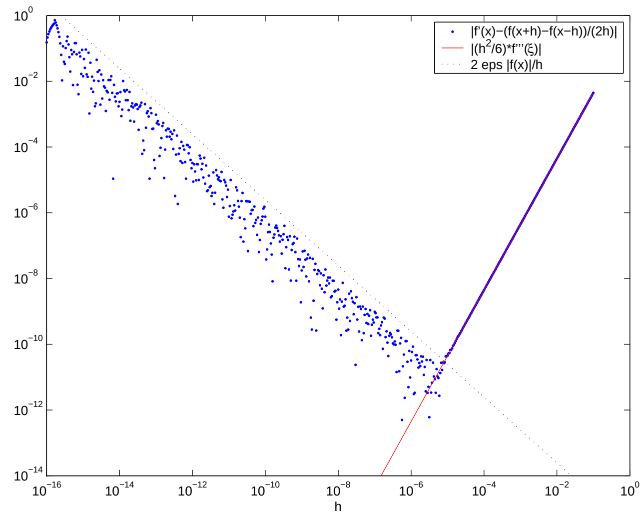
Als $[D_{\frac{1}{4}h_0}^\star f(x) - D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x)] \approx \frac{1}{2}[D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x) - D_{h_0}^\star f(x)]$,

dan $\text{fout}_{\frac{1}{2}h_0} \approx D_{\frac{1}{2}h_0}^\star f(x) - D_{h_0}^\star f(x)$

anders, kies grotere h_0 en probeer opnieuw.

Strategie op basis van wiskundig analytische resultaten, met beperkingen door effecten van afrondfouten

Analytische conclusies zijn ongeldig als effecten van afrondfouten domineren



Pijlers (exacte) wetenschap

- **Theorie**
- **Experimenten**
- **Computer simulaties**

Simulaties om

- te testen
- te ontwerpen
- beleid te ondersteunen
- theorie te ontwikkelen

Lab. experiment ⇝ Lokaal inzicht ⇝
Theorie beschrijft lokale samenhang ⇝

Wiskunde & Simulatie ⇝ Globale inzichten

(voorheen: Wiskunde & exp. met schaalmodellen)

Zeker aspect van de werkelijkheid

$\Downarrow$ Oceanografie

Wiskundig model (PDE)

$\Downarrow$ Discretizeer

Gediscretizeerd model

$\Downarrow$

Computer model

$\Downarrow$ Computer Science

Simulatie

Simulaties

Simulaties in geval experimenten

- ∘ te duur zijn
- ∘ ongewenst zijn
- • onmogelijk zijn

Simulaties zijn aantrekkelijk door

- ∘ snelle computers
- ∘ computers met veel geheugenruimte
- ∘ goedkope computers
- • **snellere, betrouwbaardere en robustere algoritmes**

Globale oceaan circulatie

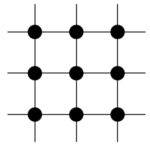
$\Downarrow$ Oceanografie, Mathematische Analyse

$-fv = -g\frac{\partial h}{\partial x} - ru + A\nabla^2 u + F_1$ (NS)

...

$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0$

$\Downarrow$ Eindige differences, eindige elementen, eindige volumes, ... Numerieke Wiskunde



...

$\frac{u(x+\Delta x) - u(x-\Delta x)}{2\Delta x} + \dots$

$\Downarrow$ Linearizeer

$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ Numerieke Lineaire Algebra $\Rightarrow$ Computer Science Simulatie

Waarom numeriek?

- Numerieke oplossing gewenst voor
  testen, ontwerp, beleid, onderzoek, ...
- Problemen met analytische oplossing:
  oplossing is onoverzichtelijk
  is moeilijk te verkrijgen
  alleen voor model situaties
  vereenvoudigt niet noodzakelijk het rekenwerk
- **Meeste problemen zijn niet analytisch oplosbaar**
  vb. $\int_{-\infty}^{t} e^{-s^2}\,\mathrm{d}s$

Waarom analyse?

Theorie levert ‘globale’ uitspraken:

- Existentie oplossing
  (correctheid model)
- Aantal oplossingen
- Structuur oplossingsruimte
- Structuur oplossing
- Stabiliteit oplossing

Veel software is beschikbaar.
Kan ik niet altijd een standaard routine gebruiken?

Voor ieder wiskundig probleem zijn er diverse algoritmes.

Er is geen “best” algoritme.

Wat het beste is hangt af van
 de aard van het wiskundig probleem
 parameters in het probleem
 de gewenste nauwkeurigheid
 beschikbare computers

Op welke zaken je moet letten?

Je moet de kwaliteit van de numerieke resulaten kunnen beoordelen.

Moderne beroepspraktijk voor een wiskundige is teamwerk.

Aan het eind van de cursus ben je

- ∘ vertrouwd met de principes van numerieke wiskunde
- ∘ kan je de kwaliteit van numerieke resultaten beoordelen
- ∘ heb je een kritische houding t.a.v. numerieke resultaten
- ∘ kan je efficiënte en betrouwbare algoritmes ontwerpen voor eenvoudige problemen
- ∘ kan je je algoritmes met wiskundige argumenten verdedigen
- ∘ voel je comfortabel bij numerieke wiskunde colleges over moeilijkere problemen

Inhoud

$f : [a, b] \to \mathbb{R}$

f', $\int_a^b f(t)\,\mathrm{d}t$, $f'(t) = F(t, f(t))$, los op $f(\alpha) = 0$
f bekend in $t_0, t_1, t_2, \ldots$: bereken $f(t)$ voor andere t
fouten, evaluatie fouten.

Waarom 1-d?

Inzichtelijker, om principes num. wisk. te begrijpen

meer dim. generaliseren 1-d

Waarom theoretisch?

- Moet leren algoritmes ontwerpen en analyseren
- Moet leren numerieke resulaten te analyseren en interpreten

Waarom praktisch?

- Schattingen bevatten onberekenbare grootheden
- Stellingen gaan uit van modelvoorwaarden
- Theorie is vaak (nog) niet voorhanden
- Theorie gebaseerd op 'n aspect dat dominant verondersteld wordt
- Experimenten leiden tot nieuw theoretisch inzicht
- Experimentele inzichten staan grote stappen in de ontwikkelingen toe

Heuristiek speelt vaak een grote rol
Heuristiek is gebaseerd op **theoretisch inzicht** gesteund door experimentele resultaten

Voorkennis

Elementaire Calculus (Infi): f', $\int_a^b f(t)\,dt$ voor $f : [a, b] \to \mathbb{R}$

$\lim\limits_{h\to 0} \ldots$, $\quad \sum\limits_{n=0}^{\infty} \ldots$ $\quad$ continu, $\quad$ differentieerbaar

differentiaalvergelijkingen: $f'(t) = \lambda f(t) + \ldots$

Taylorreeks. f voldoende glad in de buurt van x:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \ldots + \frac{h^k}{k!}f^{(k)}(x) + \text{rest}$$

met $Rest = \frac{h^{k+1}}{(k+1)!}f^{(k+1)}(\xi)$ zekere ξ tussen x en $x+h$.

Doorlopendheidsst. f continu op $[a, b]$, $f(a) \cdot f(b) < 0$.
Dan $f(\xi) = 0$ zekere $\xi \in (a, b)$.

Stelling van Rolle. f diff.baar op $[a, b]$.
Dan $f'(\xi) = \frac{f(b)-f(a)}{b-a}$ zekere $\xi \in (a, b)$.