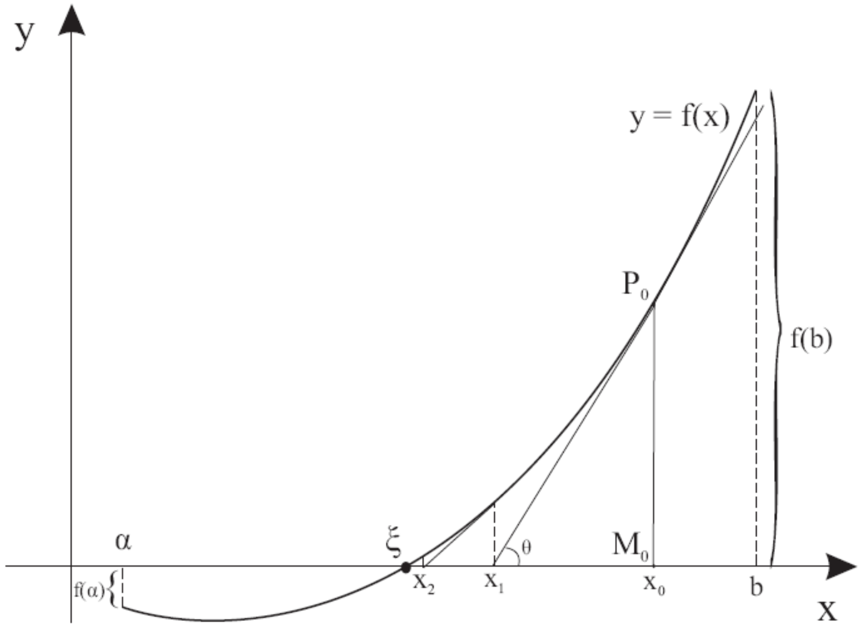
ΑΡΙΘΜΗΤΙΚΗ ΑΝΑΛΥΣΗ

Μια αλγοριθμική προσέγγιση



Ν. Μισυρλης

Περιεχόμενα

Πρόλογος

Το αντικείμενο

Η Αριθμητική Ανάλυση έχει σαν βασικό σκοπό την σχεδίαση και ανάλυση αριθμητικών αλγορίθμων για την επίλυση επιστημονικών προβλημάτων. Πολλά επιστημονικά προβλήματα καταλήγουν στην επίλυση ενός γραμμικού συστήματος. Ωστόσο, η υλοποίηση της μεθόδου του Cramer για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος σε ένα υπολογιστή είναι πρακτικά ανεφάρμοστη. Επίσης, υπάρχουν και αρκετά επιστημονικά προβλήματα που καταλήγουν στην επίλυση μιας διαφορικής εξίσωσης με συνήθεις ή μερικές παραγώγους όπου τα κλασικά Μαθηματικά αδυνατούν να παρέχουν λύση. Η Αριθμητική Ανάλυση παρέχει μεθόδους που επιλύουν αποτελεσματικά τα δύο ανωτέρω προβλήματα με τη χρήση υπολογιστή. Το πρώτο βήμα που ακολουθείται είναι η μετατροπή των μαθηματικών εξισώσεων σε αριθμητικές μεθόδους που περιέχουν τις βασικές πράξεις της Αριθμητικής (πρόσθεση, αφαίρεση, πολλαπλασιασμό και διαίρεση). Το επόμενο βήμα είναι η μελέτη της αποδοτικότητας του προκυπτόμενου αριθμητικού αλγορίθμου. Επίσης, εξ' ίσου σημαντικό θέμα που απασχολεί την Αριθμητική Ανάλυση είναι η ποιότητα της λύσης, δηλαδή πόσο πλησίον στην ακριβή λύση του προβλήματος είναι η προσέγγιση που βρέθηκε.

Η Εξέλιξη

Η χρήση των αριθμητικών μεθόδων ξεκινά από την αρχαιότητα, όταν ο Αρχιμήδης προσέγγισε αρκετά ικανοποιητικά τον αριθμό π. Όμως, η εξέλιξη της Αριθμητικής Ανάλυσης υπήρξε ραγδαία με την ανάπτυξη των ηλεκτρονικών υπολογιστών το 1950. Έκτοτε υπήρξαν δύο μεγάλοι σταθμοί που έπαιξαν σημαντικό ρόλο στην καθιέρωσή της ως ενός αυτοδύναμου κλάδου των Εφαρμοσμένων Μαθηματικών αρχικά όσο και της Πληροφορικής μεταγενέστερα. Η πρώτη σημαντική συνεισφορά υπήρξε η θεωρία σφάλματος του Wilkinson το 1960, η οποία έδωσε μια μεγάλη ώθηση στους αριθμητικούς αλγορίθμους με τον εμπλουτισμό τους από τις αντίστοιχες τεχνικές, όπως η μερική οδήγηση στη μέθοδο απαλοιφής του Gauss. Η εμφάνιση των παράλληλων υπολογιστών στα μέσα της δεκαετίας του 80 υπήρξε ο δεύτερος καθοριστικός σταθμός για την ανάπτυξη παράλληλων αριθμητικών αλγορίθμων.

Κατά τη διάρκεια της τελευταίας δεκαετίας αναπτύχθηκαν εφαρμογές σε διάφορες επιστήμες, οι οποίες χρησιμοποιούν μεθόδους της Αριθμητικής Ανάλυσης. Από τις πρώτες εφαρμογές ήταν στη Φυσική, όπου κυριαρχεί το πολύπλοκο πρόβλημα της πρόγνωσης του καιρού. Το πρόβλημα αυτό περιέχει ένα σύστημα διαφορικών εξισώσεων με μερικές ή συνήθεις παραγώγους, το οποίο επιλύεται με αριθμητικούς αλγορίθμους όπου τα τελευταία χρόνια η εισαγωγή της παραλληλίας είναι αναπόφευκτη. Παρόμοια είναι τα προβλήματα της πρόβλεψης του κλίματος, της προσομοίωσης του ωκεανού, της πρόβλεψης των σεισμών κ.α. Οι εφαρμογές είναι τόσο πολλές ώστε δημιουργήθηκαν οι κλάδοι της Υπολογιστικής Φυσικής, της Υπολογιστικής Χημείας, της Υπολογιστικής Βιολογίας, των Υπολογιστικών Οικονομικών κ.α.

Όσο αφορά την Πληροφορική η Αριθμητική Ανάλυση αποτελεί ένα αυτοδύναμο κλάδο της. Η άποψη αυτή έχει επικρατήσει από τις ολοένα αυξανόμενες χρήσεις της Αριθμητικής Ανάλυσης σε ένα μεγάλο φάσμα περιοχών της Πληροφορικής. Αυτό είναι φυσικό από την στιγμή που τα διάφορα προβλήματα της Πληροφορικής μοντελοποιούνται με μαθηματικά. Για παράδειγμα, το πρόβλημα της εύρεσης του βαθμού μιας σελίδας στο διαδίκτυο (page rank problem) καταλήγει στον υπολογισμό ενός ιδιοδιανύσματος με τη χρήση της μεθόδου των δυνάμεων. Αλλά και η εύρεση του χρωματικού αριθμού ενός γραφήματος συνδέεται, όπως αποδείχτηκε πρόσφατα, με τη φασματική ακτίνα του γειτονικού πίνακα, η οποία επίσης υπολογίζεται με τη μέθοδο των δυνάμεων. Η συνεκτικότητα ενός γραφήματος αποτελεί σημαντική ιδιότητα, η οποία είναι ισοδύναμη με το βαθμό (rank) του πίνακα πρόσπτωσης (incident matrix). Είναι γνωστό ότι ένα γράφημα είναι συνεκτικό αν και μόνο αν $rank(E) = m - 1$, όπου E είναι ο πίνακας πρόσπτωσης και m το πλήθος των κορυφών του γραφήματος. Υπολογίζοντας δηλαδή το βαθμό (rank) του E μπορούμε να αποφανθούμε για την συνεκτικότητα του γραφήματος. Ο βαθμός όμως ενός ορθογώνιου πίνακα, όπως ο E, μπορεί να υπολογιστεί με τη χρήση της μεθόδου απαλοιφής του Gauss.

Πολλά προβλήματα της Πληροφορικής μοντελοποιούνται σαν προβλήματα γραμμικής ή μη γραμμικής βελτιστοποίησης. Όσο αφορά τη γραμμική βελτιστοποίηση η χρήση της Simplex είναι μια παραλλαγή της αμέσου μεθόδου του Jordan για την επίλυση ενός γραμμικού συστήματος. Πιο πρόσφατες έρευνες προτείνουν τη μέθοδο της LU παραγοντοποίησης στην περίπτωση που ο πίνακας του συστήματος είναι αραιός. Αρκετά προβλήματα της μη γραμμικής βελτιστοποίησης ανάγονται σε ένα μη γραμμικό σύστημα, το οποίο επιλύεται με παραλλαγές της μεθόδου του Newton ή της μεθόδου Συζυγών Διευθύνσεων (Conjugate Gradient). Επίσης, τα Γραφικά βασίζονται σε μεθόδους παρεμβολής, όπως οι splines, αλλά και η τριγωνομετρική παρεμβολή με τη χρήση του Διακριτού Μετασχηματισμού Fourier (FFT) έχει πολλές εφαρμογές στην επεξεργασία σήματος, στην κβαντική μηχανική, στην οπτική καθώς και σε πολλές άλλες περιοχές. Οι αλυσίδες Markov (Markov Chains) που προκύπτουν κατά την προσομοίωση των δικτύων ουρών (queueing network) καταλήγουν σε γραμμικά συστήματα, τα οποία επιλύονται με τις αμέσους ή επαναληπτικές μεθόδους της Αριθμητικής Ανάλυσης. Μια χαρακτηριστική εφαρμογή είναι το πρόβλημα εξισορρόπησης φορτίου που προκύπτει κατά την παράλληλη επεξεργασία. Για την επίλυση του ανωτέρω προβλήματος χρησιμοποιείται η μέθοδος της Διάχυσης (Diffusion), η μελέτη της οποίας ακολουθεί την ίδια προσέγγιση με αυτή των επαναληπτικών μεθόδων της Αριθμητικής Ανάλυσης.

Τα τελευταία χρόνια δημιουργήθηκε η περιοχή της Υπολογιστικής Επιστήμης ή των Επιστημονικών Υπολογισμών, η οποία χρησιμοποιεί την αριθμητική προσομοίωση με ό,τι πιο σύγχρονο αφορά στο περιβάλλον (γραφικά) και στην υλοποίησή τους (αντικειμενοστρεφής προγραμματισμός). Μάλιστα, ήδη έχουν δημιουργηθεί και ολόκληρα τμήματα σε Πανεπιστήμια στην εν λόγω περιοχή.

Χαρακτηριστικά του βιβλίου

Το παρόν βιβλίο αναφέρεται στην Αριθμητική Ανάλυση με μια αλγοριθμική προσέγγιση για να τονιστεί το γεγονός ότι δίνεται έμφαση στην εφαρμογή των αριθμητικών μεθόδων. Αυτό όμως δεν γίνεται σε βάρος της θεωρίας. Επίσης, θα πρέπει να τονιστεί ότι έχει καταβληθεί σημαντική προσπάθεια προκειμένου να προσαρμοστεί κατάλληλα η παρουσίαση της ύλης του έτσι ώστε να αποτελεί κίνητρο μελέτης όχι μόνο για φοιτητές Μαθηματικών τμημάτων αλλά και για φοιτητές/σπουδαστές που ανήκουν ιδιαίτερα σε τμήματα Πληροφορικής και γενικότερα σε άλλα τμήματα. Για τον σκοπό αυτό δίνεται έμφαση στην κατασκευαστική απόδειξη και αποφεύγεται η παράθεση υλικού με στείρα μαθηματική διαπαιδαγώγιση. Επίσης, υπάρχει τουλάχιστον ένα παράδειγμα για την κατανόηση της κάθε βασικής μεθόδου ενώ ταυτόχρονα παρουσιάζεται και ο αντίστοιχος αλγόριθμος. Ορισμένα κεφάλαια είναι εκτενή (όπως τα κεφ 2, 3 και 5) και είναι σκόπιμο να παραλειφθούν οι τελευταίες 4-5 παράγραφοι σε μια πρώτη επαφή του αναγνώστη με το αντικείμενο. Εκτός από τα παραδείγματα, υπάρχουν στο τέλος κάθε κεφαλαίου ασκήσεις, οι οποίες είναι κλιμακούμενης δυσκολίας. Οι περισσότερες ασκήσεις μπορούν να λυθούν χωρίς τη χρήση υπολογιστή, προκειμένου ο αναγνώστης να εξασκηθεί με την ακολουθία των υπολογισμών μιας συγκεκριμένης μεθόδου.

Η Δομή της ύλης

Το βιβλίο αποτελείται από 10 κεφάλαια. Το κεφάλαιο 1 αρχίζει με την παρουσίαση της παράστασης των αριθμών στη μνήμη ενός υπολογιστή και τη μελέτη του υπεισερχόμενου σφάλματος λόγω του πεπερασμένου μήκους λέξης για την παράστασή τους. Ειδικότερα μελετάται η επίδραση του σφάλματος στρογγύλευσης στον υπολογισμό αθροίσματος όρων καθώς και τον ρόλο που παίζει το διαδιδόμενο σφάλμα. Το πρόβλημα της εύρεσης προσεγγιστικών τιμών για τις ρίζες μιας μη γραμμικής εξίσωσης, είναι το αντικείμενο του κεφαλαίου 2. Καταρχήν παρουσιάζονται αριθμητικές μέθοδοι για τον υπολογισμό μιας ρίζας (σταθερού σημείου, Newton-Raphson, τέμνουσας). Στη συνέχεια μελετώνται αριθμητικές μέθοδοι για τον υπολογισμό όλων των ριζών (πραγματικών ή/και μιγαδικών) ενός πολυωνύμου.

Τα επόμενα τρία κεφάλαια αποτελούν το βασικό κορμό της Αριθμητικής Γραμμικής Άλγεβρας καθόσον μελετούν τα προβλήματα της αριθμητικής επίλυσης ενός γραμμικού συστήματος και τον υπολογισμό του ιδιοσυστήματος (ιδιοτιμές και ιδιοδιανύσματα) ενός πίνακα. Το κεφάλαιο 3 παρουσιάζει αριθμητικές μεθόδους για την επίλυση πυκνών γραμμικών συστημάτων (απαλοιφή Gauss, Jordan και LU). Στην περίπτωση που ο πίνακας των συντελεστών του συστήματος είναι αραιός, τότε χρησιμοποιούνται οι επαναληπτικές μέθοδοι του κεφαλαίου 4. Ας σημειωθεί ότι ο τρόπος γέννεσης των επαναληπτικών μεθόδων είναι διαφορετικός από αυτόν που εμφανίζεται στη βιβλιογραφία αφού βασίζεται στην τεχνική της προ-συνθήκης (preconditioning). Χαρακτηριστικό αυτής της προσέγγισης είναι η δημιουργία μιας επαναληπτικής μεθόδου σε μορφή πινάκων και ακολούθως η μετατροπή της σε μορφή συνιστωσών σε αντίθεση με τη βιβλιογραφία.

Το κεφάλαιο 5 παρουσιάζει αριθμητικές μεθόδους για τον υπολογισμό των ιδιοτιμών και των ιδιοδιανυσμάτων ενός πίνακα. Καταρχήν αναπτύσσεται η θεωρία της μεθόδου των δυνάμεων για τον υπολογισμό της μεγαλύτερης κατά μέτρο ιδιοτιμής με τις παραλλαγές της (πηλίκα Rayleigh, μετατόπιση της αρχής των αξόνων, αντίστροφη μέθοδος των δυνάμεων). Η μέθοδος των δυνάμεων και οι παραλλαγές της δημιουργούν μια ακολουθία, η οποία συγκλίνει στη μεγαλύτερη/μικρότερη κατά μέτρο ιδιοτιμή. Οι επόμενες μέθοδοι (Jacobi, Givens, Householder) βασίζονται σε μετασχηματισμούς ομοιότητας πινάκων προκειμένου να υπολογίσουν όλες τις ιδιοτιμές και τα ιδιοδιανύσματα ενός πίνακα.

Το κεφάλαιο 6 διαπραγματεύεται το πρόβλημα της πολυωνυμικής παρεμβολής, το οποίο εντάσσεται στο γενικότερο πρόβλημα της προσέγγισης μιας συνάρτησης ή των τιμών της σε δεδομένα σημεία, με ένα πολυώνυμο. Αν τα δεδομένα σημεία ισαπέχουν, τότε το πολυώνυμο παρεμβολής βρίσκεται εύκολα με την χρήση των πεπερασμένων διαφορών. Στην περίπτωση μη ισαπεχόντων σημείων παρουσιάζονται οι μέθοδοι Lagrange και των διηρημένων διαφορών του Newton. Για μικρό σχετικά πλήθος σημείων πιο κατάλληλες είναι οι επαναληπτικές μέθοδοι παρεμβολής (Aitken, Neville). Η παρεμβολή με splines εφαρμόζει μια κατά τμήματα πολυωνυμική παρεμβολή προκειμένου να αποφύγει τα προβλήματα που δημιουργούνται όταν τα σημεία παρεμβολής είναι πολλά και κατά συνέπεια ο βαθμός του πολυωνύμου παρεμβολής είναι μεγάλος. Η μορφή αυτή της παρεμβολής χρησιμοποιείται ευρέως στα γραφικά με υπολογιστή. Στο κεφάλαιο 7 μελετάται η μέθοδος των ελαχίστων τετραγώνων που είναι μια άλλη μέθοδος για την προσέγγιση μιας συνάρτησης με πολυώνυμο μικρότερου βαθμού από εκείνου της παρεμβολής. Όπως αντιλαμβάνεται κανείς και από την ονομασία ο προσδιορισμός του πολυωνύμου βασίζεται στην ελαχιστοποίηση του αθροίσματος των τετραγώνων των σφαλμάτων στα σημεία για τα οποία είναι γνωστή η τιμή της συνάρτησης. Η έκφραση του πολυωνύμου συναρτήσει μιας κατηγορίας ορθογωνίων πολυωνύμων παρέχει τη δυνατότητα της επεξεργασίας μεγάλου πλήθους δεδομένων σημείων.

Τα επόμενα δύο κεφάλαια προϋποθέτουν τις γνώσεις του κεφαλαίου της παρεμβολής. Πιο συγκεκριμένα το κεφάλαιο 8 μελετά αριθμητικές μεθόδους παραγώγισης μιας συνάρτησης, ενώ το κεφάλαιο 9 ασχολείται με το πρόβλημα της αριθμητικής ολοκλήρωσης. Έχοντας προσδιορίσει το πολυώνυμο παρεμβολής είναι σχετικά εύκολο να υπολογιστούν οι παράγωγοί του. Το ενδιαφέρον στο παρόν κεφάλαιο είναι η μελέτη του σφάλματος αποκοπής καθώς και η εναλλακτική μέθοδος των προσδιοριστέων συντελεστών για την εύρεση τύπων αριθμητικής παραγώγισης και του αντίστοιχου σφάλματος. Όμοια είναι η πορεία που ακολουθείται και στο κεφάλαιο 9. Η εύρεση του ορισμένου ολοκληρώματος μιας συνάρτησης ανάγεται στην ολοκλήρωση του αντίστοιχου πολυωνύμου παρεμβολής. Ανάλογα με το πλήθος των σημείων παρεμβολής έχουμε τους διάφορους τύπους αριθμητικής ολοκλήρωσης (Τραπεζίου, Simpson). Η μελέτη του σφάλματος στην αριθμητική ολοκλήρωση δίνει τη δυνατότητα της αξιολόγησης των διαφόρων τύπων. Να σημειωθεί ότι στο παρόν κεφάλαιο παρουσιάζεται διεξοδικά η εναλλακτική μέθοδος των προσδιοριστέων συντελεστών για την παραγωγή τύπων αριθμητικής ολοκλήρωσης και την εύρεση των αντίστοιχων σφαλμάτων. Η ολοκλήρωση του Romberg και Gauss χρησιμοποιείται για τις περιπτώσεις όπου απαιτείται μεγάλη αποδοτικότητα και υψηλή ακρίβεια υπολογισμών.

Τέλος, το κεφάλαιο 10 διαπραγματεύεται το πρόβλημα της αριθμητικής επίλυσης συνήθων διαφορικών εξισώσεων. Οι αριθμητικές μέθοδοι που παρουσιάζονται βασίζονται στο ανάπτυγμα Taylor μιας συνάρτησης. Οι πιο δημοφιλείς είναι οι μέθοδοι των Runge-Kutta, οι οποίες καλούνται μέθοδοι του απλού βήματος καθ' όσον απαιτείται μόνο η τρέχουσα προσεγγιστική τιμή για τον υπολογισμό της επόμενης. Αν απαιτούνται περισσότερες προηγούμενες προσεγγιστικές τιμές, τότε έχουμε τις μεθόδους του πολλαπλού βήματος. Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με την παρουσίαση της αριθμητικής επίλυσης ενός προβλήματος συνοριακών τιμών. Αξίζει να σημειωθεί ότι η ακολουθούμενη μεθοδολογία είναι όμοια με αυτή για την αριθμητική επίλυση προβλημάτων που χρησιμοποιούν διαφορικές εξισώσεις με μερικές παραγώγους.

Συμπληρωματικό υλικό

Οι διαφάνειες των παραδόσεων του μαθήματος καθώς και επιπρόσθετο υλικό είναι διαθέσιμα στην ιστοσελίδα `http://eclass.di.uoa.gr/D16`.

Ευχαριστίες

Το βιβλίο αυτό είναι το αποτέλεσμα της πολύχρονης διδασκαλίας της Αριθμητικής Ανάλυσης στα Τμήματα Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών και Μαθηματικών του Εθνικού και Καποδιστριακού Πανεπιστημίου Αθηνών. Έχει γραφεί σε Latex και σε αυτό συνέβαλαν αρκετοί μεταπτυχιακοί φοιτητές και υποψήφιοι διδάκτορες του τμήματος Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών του Πανεπιστημίου Αθηνών. Ιδιαίτερα θα ήθελα να ευχαριστήσω τους υποψήφιους διδάκτορες Β. Κουντουριώτη και Μ. Λουκά. Ο πρώτος είχε το βάρος της διαμόρφωσης μιας αρχικής έκδοσης ενώ η δεύτερη ανέλαβε με ιδιαίτερο ζήλο να διεκπεραιώσει την τελική μορφή του κειμένου καθώς και τον εμπλουτισμό, ορισμένων κεφαλαίων, με παραδείγματα. Σημαντικές υπήρξαν οι παρατηρήσεις - διορθώσεις του Επίκουρου Καθηγητή Φ. Τζαφέρη, τον οποίο επίσης ευχαριστώ ιδιαίτερα.

Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω την οικογένειά μου για την συμπαράσταση και την ενθάρρυνση κατά τη διάρκεια της συγγραφής του παρόντος.

Μάϊος 2009 Νικόλαος Μισυρλής