Numerisk Analys, MMG410. Lecture 1.

Kursinformation

- Distansundervisning i Zoom, se kursens sida för Zoom-länkar.
  - Zoom för föreläsningar och datorlabbar:
    Meeting ID: 622 2565 2199
    Passcode: 878463
  - Jitsi länk för datorlabbar:
    `https://meet.jit.si/mmg410complab`
- Kursansvarig och examinator: Larisa Beilina, larisa@chalmers.se
- Handledare för datorlaborationer och övningar med Matlab:
  - Morgan Görtz, morgan.gortz@fcc.chalmers.se,
- Registrering på kursen: kontakta studieadministratör Jeanette Montell, jw@chalmers.se.

Schema

Dag	Tid	Plats	Typ
Mån	13:15-15:00	Zoom	Förel
Ons	13:15-15:00	Zoom	Förel
Fre	13:15-15:00	Zoom	Förel
Mån	15:15-17:00	Zoom	Datorlab
Ons	15:15-17:00	Zoom	Datorlab
Fre	15:15-17:00	Zoom	Datorlab
04.06.2021	14.00-18.00	?	Tentamen
25.08.2021	14.00-18.00	?	Omtentamen
?.01.2022	14.00-18.00	?	Omtentamen

Kurslitteratur

- **Michael T. Heath, Scientific Computing - An introductory survey, McGraw-Hill, 2002.**

  Den äldre upplagan från 1997 duger också. Köp boken via internet.

- **Föreläsningsanteckningar** finns på kursens hemsidan. Flera studenter tycker att boken ej är nödvändig nu när det finns föreläsningsanteckningar (kopior av slides) på kursens hemsidan. Om man skall klara sig med dessa kopior måste man nog gå på föreläsningarna.

- Mina anteckningar/slider och video på kursens sida.

Former för bedömning

- Kursen består av två poäng-givande moment, laboration och tentamen, 3 Hp för lab och 4.5 Hp för tentamen.
- Vi planerar att ha 3 bonuspoängövningar, som ska utföras i en grupp av cirka 10 personer/grupp. De ska lämnas via "Uppgift" i Canvas (se kursens sida). Hela gruppen kan få max 0.5 bp. för varje övningstillfälle, max 1.5 b.p. för hela kursen. Tider för bonuspoängövningar finns på kursens hemsida.
- Skriftlig tentamen samt examination av datorlaborationer sker i form av skriftliga redovisningar via "Uppgift" i Canvas.
- Tre obligatoriska laborationer som skall utföras i grupper om precis två personer. Redovisa en lab så fort du är färdig.
- För att erhålla betyg på hela kursen krävs att samtliga obligatoriska moment fullgjorts.
- Vi ska ha 2 extra tentamenstillfällen: i augusti och i januari.

Betyg

- Betygskalan omfattar betygsgraderna Underkänd (U), Godkänd (G) och Väl godkänd (VG).

Skriftlig tentamen	Matlab övningar	Betyg på hela kursen
VG	G	VG
VG	U	U
G	G	G
G	U	U
U	G	U

- Student som enligt avtal har rätt att få betyg satt med ECTS-skalan ska informera kursansvarig om detta senast en vecka efter kursstart. För student utan sådant avtal sätts inga ECTS-betyg. En ECTS-översättning görs schablon-mässigt enligt av rektor fastställd mall.

Kursutvärdering

Kursutvärdering görs med en enkät och samtal med studentrepresentanter.
På kursens aktivitet i GUL (inloggning via Studentportalen) finns en enkät som används vid utvärderingen. Utvärderingen sker genom samtal mellan lärare och studentrepresentanter under kursens gång samt vid ett möte efter kursens slut då enkätresultatet diskuteras och rapport skrivs på speciell blankett.

Kursinnehåll

- Grundläggande egenskaper hos flyttalsräkning.
- Grundläggande begrepp, felanalys och datoraritmetik.
- NLA problem och minstakvadratproblem.
- Några vanliga numeriska metoder för interpolation, derivering, integrering.
- Lösning av icke-linjära ekvationer, system av linjära och icke-linjära ekvationer samt Ordinarie differentialekvationer.

Kursmål

Efter avslutad kurs skall studenten

- vara förtrogen med grundläggande egenskaper hos flyttalsräkning;
- kunna bedöma tillförlitligheten hos beräknade resultat;
- kunna ställa upp några grundläggande numeriska problem på standardform;
- kunna härleda grundläggande metoder för några beräkningsproblem;
- kunna lösa enkla tillämpningsproblem med hjälp av Matlab.

Fyra sista punkterna endast avser de problemområden som står under rubriken "Kursinnehåll".

Introduktion. Vad är numerisk analys?

Numerisk analys handlar om hur man löser beräkningsproblem på ett säkert och effektivt sätt med hjälp av dator. Några viktiga komponenter:

- Problemets egenskaper
  - Problemen kommer från naturvetenskap, teknik, matematik etc.
  - Existerar det någon lösning?
  - Är den entydig?
  - Vad händer med lösningen när man ändrar indata något (stabiliteten) ?
- Algoritmens egenskaper:
  - Hur snabb är metoden, implementationen?
  - Hur mycket minne går åt?
  - Vilka fel introduceras av algoritmen (avrundningsfel etc)?

Olika typer av fel

Fel som vi som numeriker inte kan göra så mycket åt, är:

- modellfel, bortser från luftmotstånd, friktion.

  Exempel: modelen är tidsberoende Maxwell's ekvation (PDE):

$$
\begin{aligned}
\varepsilon(x)\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} + \nabla \times \nabla \times E(x,t) &= 0, \text{ in } \Omega \times (0,T], \\
\nabla \cdot (\varepsilon E)(x,t) &= 0,
\end{aligned} \tag{1}
$$

  Använder transformation:

$$
\nabla \times \nabla \times E = \nabla(\nabla \cdot E) - \nabla \cdot (\nabla E) \tag{2}
$$

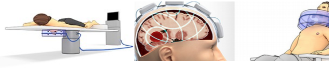
  Ny approximation av modellen är:

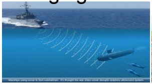
$$
\varepsilon(x)\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} - \triangle E(x,t)) = 0, \text{ in } \Omega \times (0,T], \tag{3}
$$

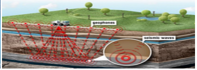
- mätfel, vågar etc. är inte exakta mellanavrundningar

Olika typer av fel: modellfel (exempel)

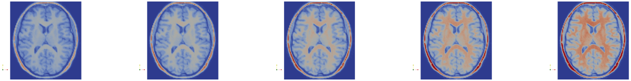
Microwave medical imaging | Acoustic imaging | Elastic imaging







Examples of CIPs. Biomedical Imaging at the Department of Electrical Engineering at CTH, Chalmers. Left: breast cancer detection, setup of Stroke Finder; microwave hyperthermia in cancer treatment; Middle: acoustic imaging; right: subsurface imaging.



Example of ill-posed problem: restoration of MRI images for the parietal lobe `http://brain-development.org/`

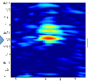
- Inverse and ill-posed problems arise in many real-world applications including medical microwave, optical and ultrasound imaging, MRT, MRI, oil prospecting and shape reconstruction, nondestructive testing of materials and detection of explosives, seeing through the walls and constructing of new materials.
- Physical applications are modelled by acoustic, elastic or electromagnetic wave eq. which include different physical parameters s. t. wave speed c - acoustic equation; elasticity parameters λ and μ - elastic equations; dielectric permittivity ε, magnetic permeability μ, conductivity σ - Maxwell's eq.
- A coefficient inverse problem for a given model PDE aims at estimating a spatially distributed coefficient of the model PDE using measurements taken on the boundary of the domain of interest.

Coefficient Inverse Problems: main steps in solution

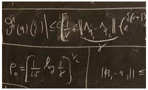
Coefficient Inverse Problems for PDE

A coefficient inverse problem for a given partial differential equation (PDE) aims at estimating a spatially distributed coefficient of the model PDE using measurements taken on the boundary of the domain of interest.

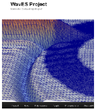
Use collected data. Data is generated by different type of waves (acoustic, elastic, electromagnetic)



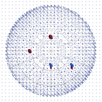
Extract image data for analysis.



Develop new mathematical methods for reconstruction of spatially distributed coefficients in the model PDE which describes the physical process.

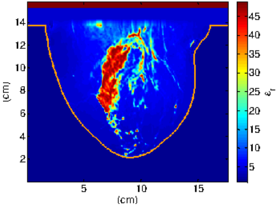


Implement new methods using fast and robust numerical methods.

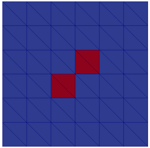


Visualize and analyze obtained reconstructions. Estimate error in the reconstruction.

Olika typer av fel: modellfel (exempel)



ε_r: real data



$\varepsilon_r = const.$

Tidsberoende Maxwell's ekvation (PDE):

$$\begin{aligned} \varepsilon(x)\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} + \nabla \times \nabla \times E(x,t) = 0, \ \text{in} \ \ \Omega \times (0,T], \\ \nabla \cdot (\varepsilon E)(x,t) = 0, \end{aligned} \tag{4}$$

Ny approximation av Maxwell's ekvation:

$$\varepsilon(x)\frac{\partial^2 E(x,t)}{\partial t^2} - \triangle E(x,t)) = 0, \ \text{in} \ \ \Omega \times (0,T], \tag{5}$$

Example

Vi är intresserade av olika typer av beräkningsfel:

- Avrundningsfel i Matlab:

  49 * (1 / 49) - 1

  ans = -1.1102e-16

  Men:

  49/49 - 1

  ans = 0

- Trunkeringsfel: exempel (Taylorsutveckling för e^x)

$$e^x \approx \sum_{k=0}^{N} \frac{x^k}{k!} = 1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + ... + \frac{x^N}{N!}$$

- Diskretiseringsfel:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

  Viktigt att välja "lagom stort" h.

Fel: absoluta och relativa felet (enkelt fall)

Låt $\hat{x}$ vara en approximation av det exakta värdet x när $\hat{x} \geq x$.
Vi definerar:

- absoluta felet

$$e = \hat{x} - x$$

- relativa felet för $x \neq 0$ är:

$$e_r = \frac{\hat{x} - x}{x}$$

Absoluta fel är ointressanta om vi inte vet ungefär hur stort x är.

Example

Är 1.4 ett stort absolut fel? Ja, om det exakta värdet är 2, men inte om det exakta värdet är 10^9.
De relativa felen är 0.7 respektive $1.4 \cdot 10^{-9}$ därför att:
a) Absoluta fel: $1.4 = \hat{x} - 2$, relativa felen: $0.7 = \frac{\hat{x}-2}{2}$.
b) Absoluta fel: $1.4 = \hat{x} - 10^9$, relativa felen: $1.4 \cdot 10^{-9} = \frac{\hat{x}-10^9}{10^9}$.

Fel: absoluta och relativa felet (gemensamt fall)

Låt $\hat{x}$ vara en approximation av det exakta värdet x.
Vi definerar:

- absoluta felet

$$e = |\hat{x} - x|$$

- relativa felet för $x \neq 0$ är:

$$e_r = \frac{|\hat{x} - x|}{|x|}$$

Kom ihåg:

$$|x| = \begin{cases} x & \text{om } x \geq 0 \\ -x & \text{om } x < 0 \end{cases}$$

Fel: absoluta och relativa felet (gemensamt fall)

Kom ihåg:

$$|x-y| = \begin{cases} x-y & \text{om } x \geq y \\ y-x & \text{om } x < y \end{cases}$$

Example

Är 1.4 ett stort absolut fel? Ja, om det exakta värdet är 2, men inte om det exakta värdet är 10^9.
a) Absoluta fel i gemensamt fall: $1.4 = |\hat{x} - 2|$,

$$1.4 = |\hat{x}-2| = \begin{cases} \hat{x}-2 & \text{om } \hat{x} = 3.4 \\ 2-\hat{x} & \text{om } \hat{x} = 0.6 \end{cases}$$

relativa felen:

$$0.7 = \frac{|\hat{x}-2|}{|2|} = \begin{cases} \frac{\hat{x}-2}{2} & \text{om } \hat{x} = 3.4 \\ \frac{2-\hat{x}}{2} & \text{if } \hat{x} = 0.6 \end{cases}$$

b) Absoluta fel: $1.4 = |\hat{x} - 10^9|$, relativa felen: $1.4 \cdot 10^{-9} = \frac{|\hat{x}-10^9|}{|10^9|}$.

Fel

På samma sätt kan det absoluta felet 10^{-20} vara stort eller litet. Det är viktigt att känna till problemets skalning.

Example

Absoluta fel för exacta 2 (om $\hat{x} \geq 2)$: $10^{-20} = \hat{x} - 2$, relativa felen: $0.5 \cdot 10^{-20} = \frac{\hat{x}-2}{2}$.

Relativa fel säger något även om vi inte känner till problemets skalning. Vi kommer därför att vara mer intresserade av relativa fel än av absoluta fel.

Nollställen till polynom

Beräkna rötterna till $(x-1)^5 = 0$ i Matlab (där vi räknar med 16 siffror). Matlab vill ha en vektor med koefficienter:

$$(x-1)^5 = x^5 - 5x^4 + 10x^3 - 10x^2 + 5x - 1$$

Vi ser att alla rötterna $x = 1$. Men i Matlab har vi:
koefficienter :
$r = roots([1 \ -5 \ 10 \ -10 \ 5 \ -1])$
rötterna:
$r = 1.0008 + 0.0006i$
$1.0008 - 0.0006i$
$0.9997 + 0.0009i$
$0.9997 - 0.0009i$
0.9990
Felen:
$disp(abs(r-1)')$
1.1322e-03 1.1322e-03 1.1326e-03 1.1326e-03 1.1328e-03

Varför? Lös

$$(x-1)^5 = \varepsilon,$$

då

$$x = 1 + \varepsilon^{1/5}$$

Om $\varepsilon = 10^{-15}$ så är $\varepsilon^{1/5} = 10^{-15/5} = 10^{-3}$. Nollställena till polynomet $(x-1)^5$ är tydligen känsliga för störningar i koefficienterna.

Är det alltid svårt att beräkna nollställen?

Koefficienter:

c = [1 -15 85 -225 274 -120];

De exakta röttena är olika nu = 1,2,3,4,5:

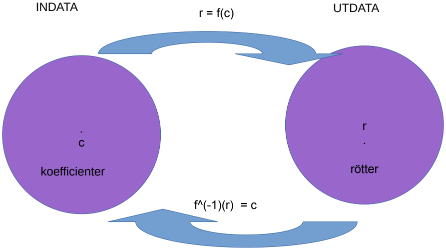
r = roots(c);

fel = sort(r) - (1:5)'

Felen är mycket mindre nu:

fel = -4.9960e-15 6.6613e-14 -1.5010e-13 9.6811e-14 -8.8818e-16

Konditionstal



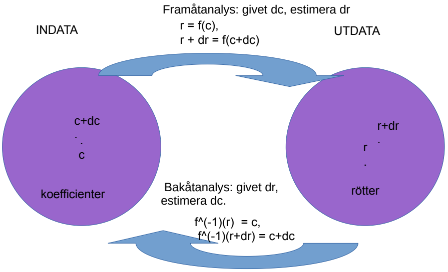
Vi kan betrakta rötterna r som funktioner $f(c)$ av koefficienterna c:

$$r = f(c),$$

var r är lösning för

$$p(x) = \sum_{i=0}^{d} c_i x^i = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \ldots + c_d x^d = 0.$$

Konditionstal



När vi stör koefficienterna $c + \delta c$, då stör vi också rötterna $r + \delta r$
Om liten relativ ändring av indata $|\delta c|/|c|$ ger en liten relativ ändring av resultatet $|\delta r|/|r|$ säger man att det aktuella problemet är välkonditionerat. Om resultatet ändrar sig mycket är problemet illakonditionerat. Konditionstalet är kvoten mellan de relativa förändringarna, dvs.

$$k = \frac{|\delta r|/|r|}{|\delta c|/|c|}$$

Stabilitet

Att beräkna konditionstalet är inte alltid möjligt; det kan vara lika svårt som att lösa det egentliga problemet. För vissa problemtyper är det överkomligt. Ibland är det dock möjligt att konstruera en uppskattning k så att

$$|\delta r|/|r| \leq k|\delta c|/|c|.$$

Det räcker att känna till storleksordning på k. Är $k \approx 10$ eller är $k \approx 10^8$?

Example

Hur känsliga är rötterna, till ekvationen $x^2 + ax + b = 0$, för ändringar i a och b? Rötterna r_1 och r_2 är funktioner av a och b: $r_1(a, b), r_2(a, b)$. Låt $r = (r_1, r_2)$ beteckna en av rötterna och låt $r + \delta r$ beteckna den störda roten när vi ändrar koefficienterna med δa respektive δb.

Example

Vi har sambandet:

$$x^2 + ax + b = (r + \delta r)^2 + (a + \delta a)(r + \delta r) + (b + \delta b) = 0,$$

och vi kan skriva om den:

$$(r^2+ar+b)+(\delta r(2r+a)+\delta ar+\delta b)+((\delta r)^2+\delta a\delta r) = I_1+I_2+I_3 = 0,$$

var

$$\begin{aligned} I_1 &= (r^2 + ar + b) = 0, \\ I_2 &= (\delta r(2r + a) + \delta ar + \delta b) \approx 0, \\ I_3 &= ((\delta r)^2 + \delta a\delta r) \approx 0. \end{aligned} \tag{6}$$

Example

Från andra ekvation i systemet (6) får vi:

$$\delta r \approx -\frac{(\delta a\ r + \delta b)}{2r + a}$$

eller

$$|\delta r| \leq \frac{(|\delta a\ r| + |\delta b|)}{|2r + a|} \tag{7}$$

Eftersom r_1 och r_2 är rötter så gäller att:

$$(x - r_1)(x - r_2) = x^2 - (r_1 + r_2)x + r_1 r_2 = x^2 + ax + b$$

Vi kan jämföra koefficienterna och får

$$-(r_1 + r_2) = a, \;\; b = r_1 r_2.$$

Vi kan skriva om $r_1 - r_2 = 2r_1 + a$, och definera gapet $g := |r_1 - r_2|$.

Example

Vi kan skriva om (7)

$$|\delta r| \leq \frac{|\delta a\ r| + |\delta b|}{|g|} \tag{8}$$

Om g är liten eller $r_1 \approx r_2$, då $|\delta r|$ är stort. Dividera (8) med $|r|$ och förläng med $|a|$ respektive $|b|$.

$$\frac{|\delta r|}{|r|} \leq \frac{1}{|r|}\left(\frac{\frac{|a|}{|a|}|\delta a\ r| + \frac{|b|}{|b|}|\delta b|}{|g|}\right) \leq k \max\left(\frac{|\delta a|}{|a|}, \frac{|\delta b|}{|b|}\right), \tag{9}$$

var konditionstalet är $k \approx \frac{|a|+|b/r|}{g}$.
Observera att detta är en uppskattning av konditionstalet. Det är inte heller beräkningsbart eftersom vi måste känna r_1 och r_2.

Example

Låt

$$p(x) = (x-1)(x-1.0001) = x^2 - 2.0001x + 1.0001$$

Vi vet sedan tidigare att konditionstalet $k \approx \frac{|a|+|b/r|}{g}$ med gapet $g := |r_1 - r_2|$ har storleksordningen $1/(1.0001-1) = 10^4$:

$$k \approx \frac{|-2.0001| + |1.0001/r|}{|1.0001-1|} \approx 3 \cdot 10^4.$$

Antag att vi på något sätt har producerat de dåliga approximativa rötterna 1.11 och 0.895. De relativa felen är ungefär 11%:

$$\frac{|1-1.11|}{|1|} = 0.11, \quad \frac{|1.0001-0.895|}{|1|} \approx 0.105.$$

Example

Det störda polynomet (som har rötterna 1.11 och 0.895) är:

$$(x - 1.11)(x - 0.895) = x^2 - 2.005x + 0.99345$$

Detta innebär att vi har löst "nästan rätt problem"; vi har gjort ett relativt bra jobb med att beräkna rötterna. Att våra rötter är dåliga approximationer beror på att problemet är illakonditionerat.

Framåt- och Bakåtanalys

Vad händer när vi stör koefficienterna c (indata i det allmänna fallet) med δ_c ? Vi har sett s.k. framåtanalys: givet δc vad blir

$$\tilde{y} - y = f(c + \delta c) - f(c),$$

var $\tilde{y} = f(c + \delta c), y = f(c)$. Detta kan, som vi har sett, ge väldigt pessimistiska svar. Ett alternativ är följande: givet approximationen $\hat{r}$ till det exakta värdet r hur mycket måste vi ändra c för att $\hat{r}$ skall bli en exakt lösning till det störda problemet? Vi söker alltså δc sådant att

$$f(c + \delta c) = \hat{r}.$$

Man kallar detta bakåtanalys. Detta på grund av att vi tittar på indatasidan i stället för på resultatsidan.

Example

$$
\begin{tikzcd}[column sep=huge, row sep=huge]
x \arrow[r, "f"] \arrow[d, dash] \arrow[dr, "\tilde{f}"] & f(x) = y \arrow[d, dash] \\
\tilde{x} \arrow[r, "f"'] & \tilde{f} = f(\tilde{x}) = \tilde{y}
\end{tikzcd}
$$

Framåtfelet: $|y - \tilde{y}|$; Bakåtfelet: $|x - \tilde{x}|$;
$f(x) = \sqrt{x} = y$; $f(\tilde{x}) \approx \sqrt{2} \approx 1.4 = \tilde{y}$
Låt $y = 1.41421\ldots$
Framåtfelet: $|y - \tilde{y}| = |1.4 - 1.41421| \approx 0.014 \approx 1\%$
Bakåtfelet: $(1.4)^2 = 1.96 = \tilde{x}$,
$\sqrt{1.96} = 1.4$ och $|x - \tilde{x}| = |1.96 - 2| = 0.04 \approx 4\%$

Övning

Vi vill lösa ekvationen $x^2 + ax + b = 0$ då vi vet att a och b båda är positiva och där a är mycket större än b, $a >> b$. Den matematiska formeln inte fungerar tillfredsställande när vi räknar med avrundningsfel. Visa att rötterna är välkonditionerade genom att uppskatta konditionstalen med formeln som vi härledde på föreläsning 1 (det finns en stor rot (mycket negativ) och en liten (nära noll)).
Vi kan uppskatta konditionstalen enligt formeln som vi härledde på föreläsning för $x^2 + ax + b = 0$:

$$k = \frac{|a| + |b/r|}{|g|}$$

Visa att den stora roten går bra att beräkna med standardformeln, men att det blir problem med den lilla. Försök att hitta en bra algoritm för den lilla roten. Taylorutveckling är, som oftast, ett användbart redskap i detta sammanhang.

Övning

<u>Lösning:</u>
Låt oss kalla den stora (negativa) roten R och den lilla, nära noll, r.
Standardformeln och Taylorutveckling ger:

$$R = -\frac{a}{2} - \sqrt{\frac{a^2}{4} - b} = -\frac{a}{2}\left[1 + \sqrt{1 - \frac{4b}{a^2}}\right] = -\frac{a}{2}\left[2 - \frac{2b}{a^2} - \frac{2b^2}{a^4} - \dots\right] \approx -a,$$

$$r = -\frac{a}{2} + \sqrt{\frac{a^2}{4} - b} = \frac{a}{2}\left[-1 + \sqrt{1 - \frac{4b}{a^2}}\right] = \frac{a}{2}\left[-\frac{2b}{a^2} - \frac{2b^2}{a^4} - \dots\right] \approx -\frac{b}{a}$$

Vi kan uppskatta konditionstalen enligt formeln som vi härledde på föreläsning 1 :

$$k_R = \frac{|a| + |b/R|}{|R - r|} \approx \frac{a + b/a}{a} \approx 1,$$
$$k_r = \frac{|a| + |b/r|}{|R - r|} \approx \frac{a + b/(b/a)}{a} \approx 2.$$

När vi beräknar $r = -\frac{a}{2} + \sqrt{\frac{a^2}{4} - b}$ kommer att få utskiftning av b. I det mest extrema fallet kommer inte b alls med och approximationen blir noll. Hur skall vi beräkna r? Ett sätt är att använda utvecklingen ovan:

$$r = -\frac{b}{a} - \frac{b^2}{a^3} - \frac{2b^3}{a^5}...$$

Ett standardtrick är att förlänga med konjugatet,

$$r = \frac{\left(-\frac{a}{2} + \sqrt{\frac{a^2}{4} - b}\right)\left(-\frac{a}{2} - \sqrt{\frac{a^2}{4} - b}\right)}{-\frac{a}{2} - \sqrt{\frac{a^2}{4} - b}} = \frac{b}{-\frac{a}{2} - \sqrt{(\frac{a}{2})^2 - b}}.$$

Ytterligare ett sätt, är att göra en transformation så att r blir en dominant rot i det transformerade problemet. Sätt $y = 1/x$ (så att $r \to 1/r$). Ekvationen $x^2 + ax + b = 0$ övergår då till $y^2 + (a/b)y + 1/b = 0$. Om vi använder standardformeln får vi för den sökta roten:

$$\frac{1}{r} = -\frac{a}{2b} - \sqrt{\frac{a^2}{4b^2} - \frac{1}{b}}.$$