Συνοπτικές Σημειώσεις - Υπολογιστική Φυσική

Πετρίδης Κ. - Ε.Κ.Π.Α

1 Εισαγωγή

Αυτές οι σημειώσεις αποτελούν προσωπικές, συνοπτικές καταγραφές για το μάθημα της Υπολογιστικής Φυσικής. Ενδέχεται να υπάρχουν λάθη και παραλείψεις, τις οποίες θα με χαροποιούσε ιδιαίτερα να μου τις επισημάνετε μέσω email στο costpetrides@icloud.com. Κατά συνέπεια, οι σημειώσεις αυτές σε καμία περίπτωση δεν μπορούν να αντικαταστήσουν την παρακολούθηση των διαλέξεων. Σας συνιστώ να παρακολουθείτε τις διαλέξεις του μαθήματος και να επισκεφθείτε το GitHub repository του Καθ. Κωνσταντίνου Θεοφιλάτου, όπου μπορείτε να βρείτε εξαιρετικά προγράμματα και ασκήσεις (αξίζει να τα υλοποιήσετε και να τα "τρέξετε" μόνοι σας).

Περιεχόμενα

2 Στατιστική Ανάλυση

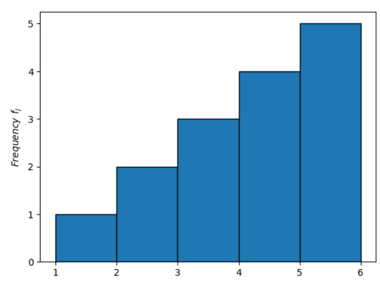
Ως φυσικοί, συχνά χρειάζεται να επεξεργαζόμαστε και να αναλύουμε τα δεδομένα μας. Αυτή είναι μια διαδικασία άρρηκτα συνδεδεμένη με την επιστήμη μας! Για τη μελέτη των δεδομένων μας, συχνά καταφεύγουμε στη δημιουργία ενός ιστογράμματος, ώστε να μελετήσουμε τη συμπεριφορά τους.

Το ιστόγραμμα αποτελεί μια γραφική απεικόνιση στατιστικών συχνοτήτων των περιοχών τιμών ενός μεγέθους. Η επιφάνεια κάθε ορθογωνίου είναι μέτρο της συχνότητας εμφάνισης της συγκεκριμένης περιοχής τιμών, ενώ το ύψος του ισούται με τον λόγο της συχνότητας προς το εύρος των τιμών που αντιπροσωπεύει το ορθογώνιο.

Για παράδειγμα, το σύνολο

$$X = [1, 2, 2, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 4, 5, 5, 5, 5, 5]$$

μπορεί να απεικονιστεί με τον παρακάτω τρόπο.



Τα σημαντικότερα στατιστικά μεγέθη για τη μελέτη ενός συνόλου είναι τα ακόλουθα:

1. **Μέση τιμή:**

$$\mu = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_i = \frac{1}{N}\sum_{j} f_j \cdot x_j \tag{1}$$

2. **Διασπορά:**

$$\sigma_x^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \mu)^2 \tag{2}$$

3. **Τυπική απόκλιση:**

$$\sigma_x = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(x_i - \mu)^2} \tag{3}$$

Στην περίπτωση που μελετάμε ένα δείγμα (*sample*), μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τη διόρθωση Bessel. Συνοπτικά, η διόρθωση Bessel είναι μια στατιστική προσαρμογή που χρησιμοποιείται για τη διόρθωση της προκατάληψης στην εκτίμηση της διακύμανσης του δείγματος. Επομένως, η *Σχέση 2* γράφεται ως:

$$s_x^2 = \frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2 \tag{4}$$

ενώ η *Σχέση 3* γράφεται ως:

$$s_x = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum_{i=1}^{N}(x_i-\mu)^2} \tag{5}$$

Παράδειγμα 1:

Για το παρακάτω σύνολο, υπολογίστε:

$$X = [1, 2, 2, 3, 3, 3, 4, 4, 4, 4, 5, 5, 5, 5, 5]$$

i. Μέση τιμή μ
ii. Διασπορά σ_x^2
iii. Τυπική απόκλιση σ_x

Λύση

3 Ψευδοτυχαίοι Αριθμοί

Η παραγωγή "ψευδοτυχαίων" αριθμών αποτελεί ένα χρήσιμο εργαλείο. Η χρήση τους είναι απαραίτητη στις μεθόδους Monte Carlo, τις οποίες θα δούμε αργότερα (The fun part...!!!).

Η παραγωγή των ψευδοτυχαίων αριθμών θα γίνει με τις εξής μεθόδους:

- LCG (Linear Congruential Generator)
- Inverse Transform Sampling*
- Hit or Miss*

* Με αυτές τις μεθόδους, μπορούμε να παράγουμε τυχαίους αριθμούς επιθυμητής κατανομής!

3.1 Linear Congruential Generator

Η μέθοδος αυτή βασίζεται στη σχέση:

$$x_{n+1} = (a \cdot x_n + c) \bmod m \tag{6}$$

όπου a: ο πολλαπλασιαστής, m: ο διαιρέτης, c: η αύξηση και x_0: η αρχική τιμή. Η πράξη mod επιστρέφει το υπόλοιπο της διαίρεσης.

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζω τις σταθερές a, c και m.

Βήμα 2. Ορίζω N (μέγεθος συνόλου ψευδοτυχαίων αριθμών) και την αρχική τιμή x_0.

Βήμα 3. Εκτελώ την επαναληπτική *Σχέση 6* (σε loop).

Η μέθοδος αυτή μπορεί να εμφανίσει δύο βασικά προβλήματα: σταθερές τιμές ή ακόμη και επαναληψιμότητα.

Παράδειγμα 2.

Φτιάξτε ένα πρόγραμμα το οποίο να παράγει "τυχαίους αριθμούς" με τη μέθοδο LCG για:

i. $a = 1103515245$, $c = 12345$, $m = 231$, $x_0 = 2$

ii. $a = 1103515245$, $c = 12345$, $m = 2^{31}$, $x_0 = 2$

Λύση

3.2 Inverse Transform Sampling

Η δειγματοληψία αντίστροφου μετασχηματισμού είναι μια μέθοδος για τη δημιουργία "τυχαίων" αριθμών από οποιαδήποτε κατανομή πιθανότητας, χρησιμοποιώντας την αντίστροφη αθροιστική κατανομή $F^{-1}(x)$. Το μόνο που χρειάζεται να διαθέτουμε είναι μία τιμή που έχει παραχθεί ομοιόμορφα στο διάστημα $[0, 1]$ και την αντίστροφη αθροιστική κατανομή $F^{-1}(x)$.

Πρόταση:
Έστω $\mathbb{F} : \mathbb{R} \to [0, 1]$ συνάρτηση κατανομής που είναι συνεχής και γνησίως αύξουσα στο $I = \{x \in \mathbb{R} : F(x) \in (0, 1)\}$. Αν $U \sim \mathrm{Unif}(0, 1)$, τότε $X = F^{-1}(U) \sim F$.

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Παράγουμε έναν τυχαίο αριθμό $U \sim [0, 1]$.

Βήμα 2. Υπολογίζουμε τον τυχαίο αριθμό μέσω της σχέσης $X = F^{-1}(U)$.

Για να εκτελέσουμε κάτι τέτοιο, πρέπει να υπολογίσουμε αρχικά την αντίστροφη αθροιστική κατανομή. Ας δούμε ένα απλό παράδειγμα.

Παράδειγμα 3.

Δημιουργείστε "τυχαίους" αριθμούς με την εξής κατανομή:

$$X \sim e^x \quad \text{για} \quad x \in [0,5]$$

Λύση:

Αρχικά κανονικοποιούμε τη συνάρτησή μας μέσω της σταθεράς κανονικοποίησης c:

$$\int_0^5 c \cdot e^x \, dx = 1 \quad \Rightarrow \quad c = \frac{1}{e^5 - 1}$$

Υπολογίζουμε την αθροιστική κατανομή:

$$F(x) = \int_0^x \frac{e^t}{e^5 - 1} \, dt = \frac{e^x - 1}{e^5 - 1}$$

Θέτουμε $F(x) = u$ και $x = X$ στην $F(x)$:

$$u(e^5 - 1) = e^X - 1 \quad \Rightarrow \quad e^X = 1 + u(e^5 - 1)$$

$$\Rightarrow F^{-1}(u) = X = \log\big(1 + u(e^5 - 1)\big) \quad *$$

* Γεννήτρια τυχαίων αριθμών με κατανομή e^x στο $[0,5]$. Το μόνο που χρειάζεται είναι να δώσετε έναν τυχαίο αριθμό $u \in [0,1]$!!!

Λύση

3.3 Hit or Miss

Με τη μέθοδο Hit or Miss ή Accept-Reject, μπορούμε να παράξουμε ψευδοτυχαίους αριθμούς που ακολουθούν μία συγκεκριμένη κατανομή, όπως και με τη μέθοδο του αντίστροφου μετασχηματισμού.

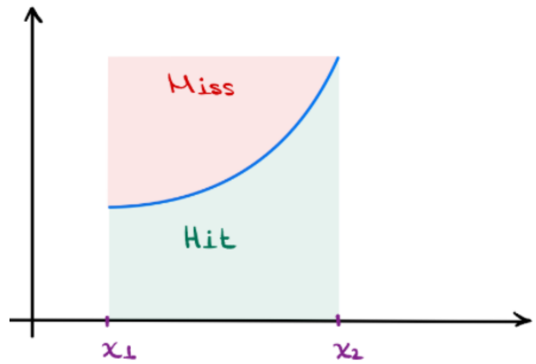
Η διαφορά έγκειται στο γεγονός ότι δεν παράγουμε τυχαίους αριθμούς μέσω μιας κατανομής, αλλά αποδεχόμαστε αυτούς που την ικανοποιούν. Έστω ότι θέλουμε να παράξουμε τυχαίους αριθμούς που ακολουθούν την κατανομή $f(x)$.

Έστω ένα τυχαίο ζεύγος $(x_i, y_i) \in [a,b] \times [0, f_{\max}]$. Εάν ικανοποιεί την παρακάτω συνθήκη, κρατάμε το x_i:

$$y_i \leq f(x_i)$$

Προσοχή:

- $x_i \sim \mathrm{Unif}(a,b)$
- $y_i \sim \mathrm{Unif}(0, f_{\max})$



! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Παράγουμε έναν τυχαίο αριθμό $x_i \sim \text{Unif}(a, b)$.

Βήμα 2. Παράγουμε έναν τυχαίο αριθμό $y_i \sim \text{Unif}(0, f_{\max})$.

Βήμα 3. Κρατάμε το x_i που ικανοποιεί τη σχέση $y_i \leq f(x_i) \rightarrow$ *Hit!*.

Αρχικά θα πρέπει να κανονικοποιήσουμε την $f(x)$ και να βρούμε το $f_{\max}$.

Παράδειγμα 4.

Δημιουργείστε "τυχαίους" αριθμούς με την εξής κατανομή, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Hit or Miss:

$$X \sim e^x \quad \text{για} \quad x \in [0, 5]$$

Λύση:

Αρχικά κανονικοποιούμε τη συνάρτησή μας μέσω της σταθεράς κανονικοποίησης c:

$$\int_0^5 c \cdot e^x \, dx = 1 \quad \Rightarrow \quad c = \frac{1}{e^5 - 1}$$

Άρα,

$$f(x) = \frac{e^x}{e^5 - 1}$$

Υπολογίζουμε το $f_{\max}$ για $x \in [0, 5]$:

$$f_{\max} = \frac{e^5}{e^5 - 1}$$

Επομένως, θα πρέπει να παράξουμε τυχαίους αριθμούς

- $x_i \sim \text{Unif}(0, 5)$
- $y_i \sim \text{Unif}(0, f_{\max})$

Θα κρατήσουμε το x_i που ικανοποιεί τη σχέση $y_i \leq f(x_i)$.

Λύση

4 Εύρεση ρίζας

Με τη χρήση αριθμητικών μεθόδων επιτυγχάνεται ο προσεγγιστικός εντοπισμός των ριζών μιας μη γραμμικής εξίσωσης $f(x) = 0$.

Για τις βασικές αριθμητικές μεθόδους που θα μελετήσουμε, υποθέτουμε ότι γνωρίζουμε ένα διάστημα $[a, b]$ εντός του οποίου βρίσκεται η μοναδική ρίζα ξ.

Για την αριθμητική επίλυση των μη γραμμικών εξισώσεων θα δούμε τις εξής μεθόδους:

- Επαναληπτικές μέθοδοι διαστημάτων (παρενθετικές)
    1. Μέθοδος Διχοτόμησης – Bisection
    2. Μέθοδος Εσφαλμένης Θέσης – Regula Falsi
- Επαναληπτικές μέθοδοι σημείου
    3. Newton-Raphson
    4. Μέθοδος Τέμνουσας – Secant
    5. Μέθοδος Σταθερού Σημείου – Fixed Point

4.1 Επαναληπτικές Μέθοδοι Διαστημάτων (Παρενθετικές)

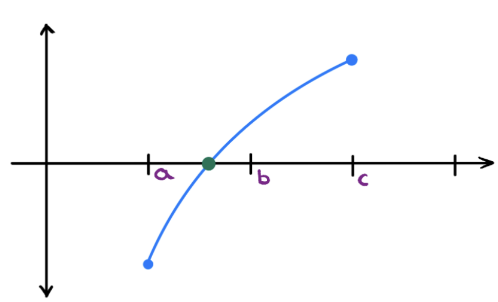
- Μέθοδος Διχοτόμησης – Bisection
- Μέθοδος Εσφαλμένης Θέσης – Regula Falsi

Από την Ανάλυση είναι γνωστό το εξής, αγαπημένο θεώρημα:

Θεώρημα – Bolzano: *Έστω $a, b \in \mathbb{R}$, με $a < b$, και $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ μια συνεχής συνάρτηση στο κλειστό διάστημα $[a, b]$, τέτοια ώστε $f(a) \cdot f(b) < 0$. Τότε, υπάρχει τουλάχιστον μία ρίζα ξ της εξίσωσης $f(\xi) = 0$ στο ανοικτό διάστημα (a, b).*

4.1.1 Μέθοδος Διχοτόμησης – Bisection

Η μέθοδος διχοτόμησης (Bisection) βασίζεται στο Θεώρημα Bolzano. Διαιρεί διαδοχικά το διάστημα $[a, b]$, λαμβάνοντας κάθε φορά εκείνο το υποδιάστημα που περιέχει τη ρίζα.



! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζεται το μέσο του διαστήματος

$$c = \frac{a+b}{2}$$

Βήμα 2. Ελέγχουμε αν $\mid f(c) \mid = 0$

Ναι: Η ρίζα είναι $\xi = c$

Διαφορετικά: Αν $f(a) \cdot f(c) < 0$, τότε

$b = c$

Διαφορετικά: Αν $f(b) \cdot f(c) < 0$, τότε

$a = c$

Βήμα 3. Επαναλαμβάνουμε τα Βήματα 1 και 2 μέχρι να ικανοποιηθεί ένα από τα ακόλουθα κριτήρια σύγκλισης:

i. $\mid f(c) \mid < \delta$

ii. $\mid c - \xi \mid < \varepsilon$

iii. $\mid f(c) \mid < \delta$ και $\mid c - \xi \mid < \varepsilon$

Το σφάλμα στη μέθοδο της Διχοτόμησης:

$$\mid \xi - c_n \mid = \left| \xi - \frac{a_n + b_n}{2} \right| \leq \frac{b_n - a_n}{2}$$

ή

$$\mid \xi - c_n \mid \leq \frac{b_0 - a_0}{2^{n+1}}$$

Για δεδομένο $\varepsilon > 0$, η απαίτηση

$$\mid \xi - c_n \mid \leq \varepsilon$$

παίρνει τη μορφή

$$\frac{b_0 - a_0}{2^{n+1}} \leq \varepsilon$$

Επομένως, μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμό επαναλήψεων για δοσμένο ε, μέσω της σχέσης

$$n \geq \frac{\log(b_0 - a_0) - \log(2\varepsilon)}{\log 2}$$

Ο ανωτέρω τύπος για δοσμένο ε δίνει ένα φράγμα (upper bound) του αριθμού επαναλήψεων n που απαιτούνται για τη σύγκλιση της μεθόδου της Διχοτόμησης, το οποίο συνήθως είναι μεγαλύτερο από τον πραγματικό αριθμό επαναλήψεων.

Παράδειγμα 5.

Δίνεται η συνάρτηση

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

η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα $(1, 2)$. Να εφαρμοστούν τέσσερις επαναλήψεις της μεθόδου της διχοτόμησης. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $| f(c) | < 1 \times 10^{-6}$.

Λύση:

1η επανάληψη: Για την πρώτη επανάληψη έχουμε $(a_0, b_0) = (1, 2)$ με $f(a_0) < 0$ και $f(b_0) > 0$. Το μέσο του πρώτου διαστήματος και η πρώτη προσέγγιση για τη ρίζα είναι

$$c_0 = \frac{a_0 + b_0}{2} = 1.5.$$

Υπολογίζουμε

$$f(c_0) = 2.375 > 0.$$

Εφόσον $f(a_0)$ και $f(c_0)$ έχουν αντίθετα πρόσημα, σύμφωνα με το Θεώρημα Bolzano η ρίζα βρίσκεται μεταξύ a_0 και c_0. Επομένως, θέτουμε $b_1 = c_0 = 1.5$ και το νέο διάστημα είναι $(a_1, b_1) = (1, 1.5)$.

2η επανάληψη: Το μέσο του νέου διαστήματος και η δεύτερη προσέγγιση για τη ρίζα είναι

$$c_1 = \frac{a_1 + b_1}{2} = \frac{1 + 1.5}{2} = 1.25.$$

Υπολογίζουμε

$$f(c_1) \approx 0.328 > 0,$$

που έχει αντίθετο πρόσημο από το $f(a_1)$. Άρα η ρίζα βρίσκεται μεταξύ a_1 και c_1, και το νέο διάστημα γίνεται $(a_2, b_2) = (1, 1.25)$.

3η επανάληψη: Υπολογίζουμε

$$c_2 = \frac{a_2 + b_2}{2} = \frac{1 + 1.25}{2} = 1.125,$$

και

$$f(c_2) \approx -0.420 < 0.$$

Εδώ, $f(a_2) < 0$ και $f(c_2) < 0$ έχουν το ίδιο πρόσημο, οπότε η ρίζα βρίσκεται μεταξύ c_2 και b_2. Άρα το νέο διάστημα είναι $(a_3, b_3) = (1.125, 1.25)$.

4η επανάληψη: Το μέσο του διαστήματος είναι

$$c_3 = \frac{a_3 + b_3}{2} = \frac{1.125 + 1.25}{2} = 1.1875.$$

Λύση

4.1.2 Μέθοδος Εσφαλμένης Θέσης - Regula Falsi

Η μέθοδος της Εσφαλμένης Θέσης βασίζεται στην ίδια ιδέα με τη μέθοδο της Διχοτόμησης, με τη διαφορά ότι το σημείο c που επιλέγουμε κάθε φορά δεν είναι το μέσο του διαστήματος, αλλά το σημείο τομής της ευθείας που ενώνει τα σημεία $(a, f(a))$ και $(b, f(b))$ με τον άξονα x. Η μέθοδος αυτή αναπτύχθηκε επειδή η μέθοδος της Διχοτόμησης συγκλίνει σχετικά αργά. Ισχύουν οι ίδιες προϋποθέσεις με τη μέθοδο της Διχοτόμησης, δηλαδή η συνάρτηση f να είναι συνεχής στο $[a, b]$ και να ισχύει $f(a) \cdot f(b) < 0$.

Η κλίση της ευθείας που περνά από τα σημεία $(a, f(a))$ και $(b, f(b))$ δίνεται από τη σχέση

$$m = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

Αν θεωρήσουμε ότι το σημείο τομής της ευθείας αυτής με τον άξονα x είναι το $(c, 0)$, τότε η κλίση της μπορεί να εκφραστεί και ως

$$m = \frac{0 - f(b)}{c - b} = -\frac{f(b)}{c - b}.$$

Ισοσταθμίζοντας τις δύο εκφράσεις για την κλίση, έχουμε

$$-\frac{f(b)}{c - b} = \frac{f(b) - f(a)}{b - a}.$$

Λύνοντας για το c, παίρνουμε την τελική μορφή

$$\boxed{c = \frac{a \cdot f(b) - b \cdot f(a)}{f(b) - f(a)}.}$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζεται το σημείο τομής της ευθείας που ενώνει τα σημεία $(a, f(a))$ και $(b, f(b))$ με τον άξονα των x:

$$c = \frac{af(b) - bf(a)}{f(b) - f(a)}$$

Βήμα 2. Ελέγχεται αν ισχύει $\mid f(c) \mid = 0$:

Ναι: Η ρίζα είναι $\xi = c$.

Διαφορετικά:

- Αν $f(a) \cdot f(c) < 0$, τότε θέτουμε $b = c$.
- Αν $f(b) \cdot f(c) < 0$, τότε θέτουμε $a = c$.

Βήμα 3. Επαναλαμβάνουμε τα βήματα 1 και 2 μέχρι να ικανοποιηθεί κάποιο από τα κριτήρια σύγκλισης:

i. $\mid f(c) \mid < \delta$

ii. $\mid c - \xi \mid < \varepsilon$

iii. $\mid f(c) \mid < \delta$ και $\mid c - \xi \mid < \varepsilon$

Παράδειγμα 6.

Δίνεται η συνάρτηση

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

η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα (1,2). Να εφαρμοστούν δύο επαναλήψεις της μεθόδου της Εσφαλμένης Θέσης. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης

$$\mid f(c) \mid < 1 \times 10^{-6}.$$

Λύση:

1η επανάληψη:

Έχουμε $(a_0, b_0) = (1, 2)$ με $f(a_0) = -1 < 0$ και $f(b_0) = 9 > 0$. Η πρώτη προσέγγιση της ρίζας είναι,

$$c = \frac{a_0 f(b_0) - b_0 f(a_0)}{f(b_0) - f(a_0)} = \frac{1 \cdot 9 - 2 \cdot (-1)}{9 - (-1)} = 1.1.$$

Προκειμένου να εξεταστεί αν η ρίζα περιέχεται στο $(a_0, c) = (1, 1.1)$ ή στο $(c, b_0) = (1.1, 2)$, υπολογίζουμε

$$f(c) = -0.549 < 0.$$

Αφού οι $f(a_0)$ και $f(c)$ έχουν το ίδιο πρόσημο, σύμφωνα με το Θεώρημα Bolzano η ρίζα βρίσκεται μεταξύ του c και του b_0.

2η επανάληψη:

Επομένως, στην επόμενη επανάληψη το νέο διάστημα είναι $(a_1, b_1) = (c, b_0) = (1.1, 2)$. Η δεύτερη προσέγγιση για τη ρίζα είναι,

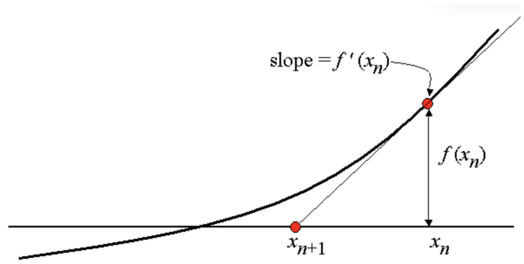
$$c = \frac{a_1 f(b_1) - b_1 f(a_1)}{f(b_1) - f(a_1)} \approx 1.1517.$$

Λύση

4.2 Επαναληπτικές Μέθοδοι Σημείου

- Newton-Raphson
- Τέμνουσας -Secant
- Σταθερού Σημείου -Fixed Point

4.2.1 Newton-Raphson



Έστω $x_n \in [a, b]$ μια προσέγγιση στη ρίζα ξ της συνάρτησης $f(x)$ με $f'(x_n) \neq 0$ και τέτοια ώστε $|x_n - \xi|$ να είναι μικρό.

Το πολυώνυμο Taylor πρώτης τάξης της $f(x)$ γύρω από το x_n είναι:

$$f(\xi) \approx f(x_n) + (\xi - x_n) f'(x_n).$$

Αφού $f(\xi) = 0$, έχουμε

$$0 \approx f(x_n) + (\xi - x_n) f'(x_n) \implies \xi \approx x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Άρα, η επαναληπτική σχέση για την εύρεση της ρίζας είναι

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζουμε την παράγωγο $f'(x)$ της συνάρτησης.

Βήμα 2. Για αρχική τιμή x_0, επιλέγουμε το σημείο a ή b που ικανοποιεί τη σχέση

$$f'(x) \cdot f(x) > 0.$$

Βήμα 3. Έχοντας επιλέξει την αρχική τιμή x_0, εκτελούμε την παρακάτω επαναληπτική σχέση μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης $| f(x_{n+1}) | < \delta$,

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Παράδειγμα 7

Δίνεται η συνάρτηση

$$f(x) = x^4 - 4x^3 + 4x^2 + x - 4,$$

η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα (2,3). Να εφαρμοστούν δύο επαναλήψεις της μεθόδου Newton–Raphson. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $| f(c) | < 1 \times 10^{-6}$.

Λύση:

$$f'(x) = 4x^3 - 12x^2 + 8x + 1$$

Υπολογίζουμε:

$$f(2) \cdot f'(2) < 0, \quad f(3) \cdot f'(3) > 0$$

Επιλέγουμε ως αρχική τιμή το δεξιό άκρο: $x_0 = 3$

1η επανάληψη:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 3 - \frac{f(3)}{f'(3)} \approx 2.680000$$

2η επανάληψη:

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 2.68 - \frac{f(2.68)}{f'(2.68)} \approx 2.5289308$$

Λύση

4.2.2 Μέθοδος Τέμνουσας (Secant)

Η βασική ιδέα είναι να προσεγγίσουμε την παράγωγο με τη διαφορά μεταξύ δύο προηγούμενων σημείων. Αντικαθιστώντας στην επαναληπτική σχέση της Newton–Raphson την παράγωγο με:

$$f'(x_n) \approx \frac{f(x_n) - f(x_{n-1})}{x_n - x_{n-1}},$$

προκύπτει η επαναληπτική σχέση της μεθόδου της Τέμνουσας:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \cdot \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Η μέθοδος αυτή δεν απαιτεί τη γνώση ή τον υπολογισμό της παραγώγου, αλλά απαιτεί δύο αρχικές τιμές x_0 και x_1 με $f(x_0) \neq f(x_1)$.

Η σύγκλιση της μεθόδου της Τέμνουσας είναι υπεργραμμική, πιο αργή από τη μέθοδο Newton–Raphson (που είναι τετραγωνική), αλλά συνήθως πιο γρήγορη από τη μέθοδο της διχοτόμησης ή της εσφαλμένης θέσης.

! Αλγόριθμος: Μέθοδος Τέμνουσας

Βήμα 1. Επιλέγουμε δύο αρχικές τιμές x_0 και x_1 ώστε $f(x_0) \neq f(x_1)$.

Βήμα 2. Υπολογίζουμε την επόμενη προσέγγιση με τη σχέση:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n) \cdot \frac{x_n - x_{n-1}}{f(x_n) - f(x_{n-1})}.$$

Βήμα 3. Επαναλαμβάνουμε το *Βήμα 2* μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης:

$$|f(x_{n+1})| < \delta,$$

για κάποιο μικρό $\delta > 0$.

Παράδειγμα 8

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^3 + 2x^2 - 3x - 1$, η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα (1,2). Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει τη ρίζα. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $\mid f(c) \mid < 1 \times 10^{-6}$.

Λύση

4.2.3 Σταθερού Σημείου - Fixed Point

Η μέθοδος του σταθερού σημείου βασίζεται στον σχηματισμό βοηθητικής συνάρτησης $g(x)$, τέτοια ώστε

$$\xi = g(\xi)$$

δηλαδή η ρίζα ξ της $f(x)$ να είναι σταθερό σημείο της $g(x)$.

Ο μετασχηματισμός πραγματοποιείται με τον εξής τρόπο:

$$f(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad x = g(x),$$

όπου

$$g(x) = x - f(x).$$

Προσοχή: Ο ορισμός της $g(x)$ δεν είναι μονοσήμαντα ορισμένος.

Παράδειγμα 9

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^2 - x - 2$. Να βρείτε μια βοηθητική συνάρτηση $g(x)$.

Λύση:

Μπορούμε να επιλέξουμε, για παράδειγμα,

$$g(x) = x^2 - 2,$$

ή

$$g(x) = \sqrt{x+2},$$

ή

$$g(x) = 1 - \frac{2}{x}.$$

Ποιά θα επιλέξω ως αναδρομική σχέση;

Κριτήρια Σύγκλισης:

1. Υπάρχει διάστημα $[a, b]$ στο οποίο ορίζεται η $g(x)$ και η τιμή της παραμένει μέσα σε αυτό, δηλαδή:
$$g : [a, b] \to [a, b]$$
2. Η συνάρτηση $g(x)$ είναι συνεχής στο $[a, b]$.

3. Η $g(x)$ είναι παραγωγίσιμη στο $[a,b]$ και υπάρχει σταθερά k, με $0 \le k < 1$, ώστε:

$$\forall x \in [a,b], \quad |g'(x)| \le k < 1.$$

Αν ισχύουν οι παραπάνω προϋποθέσεις, τότε στο διάστημα $[a,b]$ υπάρχει ακριβώς ένα σταθερό σημείο m της g, και η μέθοδος του σταθερού σημείου συγκλίνει σε αυτό το m.

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Υπολογίζουμε τη βοηθητική συνάρτηση $g(x)$ που ικανοποιεί τα τρία κριτήρια:

$$x = g(x)$$

Βήμα 2. Επιλέγουμε αρχική τιμή x_0 και εκτελούμε την επαναληπτική σχέση μέχρι να ικανοποιηθεί το κριτήριο σύγκλισης $|f(x_{n+1})| < \varepsilon$:

$$x_{n+1} = g(x_n)$$

Παράδειγμα 10

Δίνεται η συνάρτηση $f(x) = x^3 + 2x - 1$, η οποία έχει μία απλή ρίζα στο διάστημα $(0, \frac{1}{2})$. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα που θα υπολογίζει την ρίζα με την μέθοδο σταθερού σημείου. Θεωρήστε κριτήριο σύγκλισης $| f(c) | < 1.10^{-6}$.

$$f(0) = -1 \ , \ f(\frac{1}{2}) = \frac{1}{8} \ \Rightarrow \ f(0) \cdot f(\frac{1}{2}) < 0$$
$$f'(x) = 3x^2 + 2 > 0$$

Αυτά εξασφαλίζουν την μοναδικότητα της λύσης στο χωρίο μελέτης μας!

Εύρεση βοηθητικής συνάρτησης,

$$x = g(x) \ \Rightarrow \ f(x) = 0$$

$$g(x) = \frac{1}{2}(1 - x^3)$$

Θα δουλέψει; Για να απαντήσουμε σε αυτό, θα ελέγξουμε τα κριτήρια σύγκλισης που παρουσιάστηκαν πιο πάνω.

Τα δύο πρώτα κριτήρια είναι εύκολο να δούμε ότι ικανοποιούνται. Πάμε να μελετήσουμε το τρίτο!

$$g'(x) = \frac{-3}{2}x^2 \ \to \ | g'(x) | \le \frac{3}{2}x^2 \ \le \ \frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}\right)^2 = \frac{3}{8} < 1$$

Αναμένουμε να δουλέψει!!

Λύση

Εκτίμηση σφάλματος:

Από τα κριτήρια σύγκλισης έχουμε,

$$\forall x \in [a,b], \quad |g'(x)| \leq k \leq 1,$$

όπου το k δίνεται από τη σχέση,

$$k = \max_{x \in [a,b]} |g'(x)| \leq 1, \tag{7}$$

και εύκολα διαπιστώνουμε ότι ισχύει η επαναληπτική ανισότητα:

$$|c - x_{n+1}| \leq k|c - x_n|, \tag{8}$$

όπου c η σταθερή ρίζα.

Επομένως, καταλήγουμε στην εκτίμηση:

$$|c - x_n| \leq \frac{k^n}{1-k}|x_1 - x_0|, \tag{9}$$

όπου n ο αριθμός των επαναλήψεων.

5 Επίλυση Γραμμικών Συστημάτων

Γραμμικά συστήματα αποτελούνται από ένα σύνολο γραμμικών εξισώσεων, όπου οι άγνωστοι είναι μεταβλητές που πρέπει να βρεθούν ώστε να ικανοποιούνται όλες οι εξισώσεις ταυτόχρονα. Συγκεκριμένα, ένα γραμμικό σύστημα τριών αγνώστων μπορεί να γραφεί ως εξής:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3 \end{cases}$$

Για την επίλυση γραμμικών συστημάτων μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε δύο είδη μεθόδων:

- Ακριβείς Μέθοδοι
- Επαναληπτικές Μέθοδοι

5.1 Ακριβείς Μεθόδους

- Απαλοιφή Gauss
- Μέθοδος LU

5.1.1 Απαλοιφή Gauss

Η μέθοδος Gauss χρησιμοποιείται για την επίλυση συστημάτων γραμμικών εξισώσεων, φέρνοντας τον επαυξημένο πίνακα του συστήματος σε κλιμακωτή μορφή μέσω στοιχειωδών γραμμικών πράξεων. Οι βασικές αυτές πράξεις είναι:

1. Ανταλλαγή δύο γραμμών R_i και R_j:
$$R_i \leftarrow R_j$$
2. Πολλαπλασιασμός γραμμής R_i με μια σταθερά $\alpha \in \mathbb{R}$:
$$R_i \leftarrow \alpha \cdot R_i$$
3. Πρόσθεση σε μια γραμμή R_i το γινόμενο της γραμμής R_j με μια σταθερά $\alpha \in \mathbb{R}$:
$$R_i \leftarrow R_i + \alpha \cdot R_j$$

Στη συνέχεια, εφαρμόζοντας αυτές τις πράξεις διαδοχικά, φέρνουμε τον πίνακα σε κλιμακωτή μορφή, ώστε να μπορέσουμε να επιλύσουμε εύκολα το σύστημα.

Παράδειγμα 11

Να το φέρετε σε κλιμακωτή μορφή και να βρείτε την λύση αναλυτικά .. με πράξεις!!

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \end{array}\right]$$

Λύση:

$$\begin{array}{c} R_2 \leftarrow R_2 - R_1 \\ R_3 \leftarrow R_2 - 2R_1 \end{array} \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & -1 & 0 & -2 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \end{array}\right]$$

$$R_2 \leftarrow -R_2 \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & -5 & 3 & -1 \end{array}\right]$$

$$R_3 \leftarrow R_3 + 5R_2 \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 3 & 9 \end{array}\right]$$

$$R_3 \leftarrow \frac{1}{3}R_2 \left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{array}\right]$$

Επομένως η λύση είναι $(x, y, z) = (1, 2, 3)^T$

! **Αλγόριθμος Απαλοιφής Gauss:**

Βήμα 1. Ορίζουμε τους πίνακες A, b και υπολογίζουμε τον επαυξημένο πίνακα $C = (A \mid b)$ καθώς και τη διάστασή του:

$$C = \texttt{np.concatenate}((A, b), \text{axis} = 1) \quad \#\text{Python}$$

$$(n, m) = C.\texttt{shape} \quad \#\text{Python}$$

Βήμα 2. **Απαλοιφή (Elimination):** Για κάθε $i = 0, 1, \ldots, n-1$:

- Για κάθε $j = 0, 1, \ldots, n-1$, με $j \neq i$:

$$\text{ratio} = \frac{C_{ji}}{C_{ii}}$$

- Για κάθε στήλη $k = 0, 1, \ldots, m-1$:

$$C_{jk} = C_{jk} - \text{ratio} \times C_{ik}$$

Βήμα 3. **Εύρεση λύσης:** Για κάθε $i = 0, 1, \ldots, n-1$:

$$x_i = \frac{C_{i\,m-1}}{C_{ii}}$$

Παράδειγμα 12

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει την λύση του προβλήματος με την μέθοδο απαλοιφής Gauss.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & -1 & 0 \\ 2 & -1 & 1 & 3 \end{array}\right]$$

Λύση

5.1.2 Μέθοδος Doolittle-Crout (LU)

Ένα γραμμικο σύστημα $A \cdot x = b$,

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{23} & a_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

μπορεί να γραφτεί ως $L \cdot U \cdot x = b$,

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ l_{21} & 1 & 0 \\ l_{31} & l_{23} & 1 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & u_{13} \\ 0 & u_{22} & u_{23} \\ 0 & 0 & u_{33} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{bmatrix}$$

Για να διευκολύνουμε τη λύση της, αυθαίρετα θεωρούμε $l_{11} = l_{22} = l_{33} = 1$.

Για συστήματα 3x3:

$$u_{11} = a_{11}, \quad u_{12} = a_{21}, \quad u_{13} = a_{31}$$

$$l_{21} = \frac{a_{21}}{u_{11}}, \quad l_{31} = \frac{a_{31}}{u_{11}}$$

$$u_{22} = a_{22} - l_{21}u_{12}, \quad u_{23} = a_{23} - l_{21}u_{13}$$

$$l_{32} = \frac{a_{32} - l_{31}u_{12}}{u_{22}}$$

$$u_{33} = a_{33} - l_{31}u_{13} - l_{32}u_{23}$$

Προσοχή: Στόχος μας είναι, να φτιάξουμε ένα πρόγραμμα το οποίο να υπολογίζει τους πίνακες L (lowe) και U (Upper)! Πώς υπολογίζουμε την λύση;

Μέσω εμπρός αντικατάσταση, υπολογίζουμε το y,

$$L \cdot y = b \tag{10}$$

και την λύση μέσο της σχέσης,

$$U \cdot x = y \tag{11}$$

! **Αλγόριθμος LU αποσυναρμολόγησης (Doolittle):**

Βήμα 1. Ορίζουμε τους πίνακες A, L, U, όπου

$$U = A$$

και

$$L = I_n \quad (\text{μοναδιαίος πίνακας } n \times n).$$

Βήμα 2. Για κάθε $k = 1, 2, \ldots, n-1$:

* Για κάθε $j = k+1, k+2, \ldots, n$:

$$L_{jk} = \frac{U_{jk}}{U_{kk}}$$

$$U_{j,k:n} = U_{j,k:n} - L_{jk} \cdot U_{k,k:n}$$

Παράδειγμα 13

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει τους πίνακες L και U και μέσω αυτών να υπολογίσετε τη λύση του συστήματος με τη μέθοδο LU (λύνοντας την *Σχέση 7* και *Σχέση 8*).

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 4 & 3 & -1 & 6 \\ 3 & 5 & 3 & 4 \end{array}\right]$$

Λύση

5.2 Επαναληπτικές Μεθόδους

- Μέθοδος Jacobi
- Μέθοδος Gauss-Seidel

5.2.1 Μέθοδος Jacobi

Η ιδέα είναι, αν έχουμε μία προσέγγιση $x^{(k)}$ για τη λύση του συστήματος, να βρούμε έναν τρόπο να αποκτήσουμε μία καλύτερη προσέγγιση $x^{(k+1)}$. Επομένως, αναζητούμε μια ακολουθία $x^{(k)}$ που να συγκλίνει στην πραγματική λύση.

Σε ένα σύστημα 3x3:

$$\begin{aligned} a_{11} \cdot x_1 + a_{12} \cdot x_2 + a_{13} \cdot x_3 &= b_1 \\ a_{21} \cdot x_1 + a_{22} \cdot x_2 + a_{23} \cdot x_3 &= b_2 \\ a_{31} \cdot x_1 + a_{32} \cdot x_2 + a_{33} \cdot x_3 &= b_3 \end{aligned}$$

Λύνω ως προς x_1, x_2, x_3 την 1^η, 2^η και 3^η εξίσωση αντίστοιχα:

$$x_1 = \tfrac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12} \cdot x_2 - a_{13} \cdot x_3\right)$$

$$x_2 = \tfrac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21} \cdot x_1 - a_{23} \cdot x_3\right)$$

$$x_3 = \tfrac{1}{a_{33}} \left(b_3 - a_{31} \cdot x_1 - a_{32} \cdot x_2\right)$$

Επομένως, για να εφαρμόσουμε επαναληπτική διαδικασία, αρκεί να πάρουμε:

$$x_1^{k+1} = \frac{1}{a_{11}} \left(b_1 - a_{12} \cdot x_2^k - a_{13} \cdot x_3^k\right)$$

$$x_2^{k+1} = \frac{1}{a_{22}} \left(b_2 - a_{21} \cdot x_1^k - a_{23} \cdot x_3^k\right)$$

$$x_3^{k+1} = \frac{1}{a_{33}} \left(b_3 - a_{31} \cdot x_1^k - a_{32} \cdot x_2^k\right)$$

Εύκολα καταλήγουμε στην επαναληπτική σχέση,

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{j-1} a_{ij} \cdot x_j^k - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} \cdot x_j^k \right) \tag{12}$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζω τις αρχικές τιμές.

Βήμα 2. Εφαρμόζω την επαναληπτική σχέση του συστήματος (*Σχέση 9*)

Βήμα 3. Εφαρμόζω το κριτήριο σύγκλισης,

$$\mid x_i^{k+1} - x_i^k \mid \leq \varepsilon$$

Παράδειγμα 14

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει την λύση του συστήματος με την μέθοδο Jacobi.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 5 & -2 & 3 & -1 \\ -3 & 9 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & -7 & 3 \end{array}\right]$$

Αρχικά υπολογίζουμε την επαναληπτική σχέση απομονώνοντας το x_1, x_2 και x_3.

$$x_1^{\kappa+1} = \frac{-1}{5} + \frac{2}{5}x_2^\kappa - \frac{3}{5}x_3^\kappa$$

$$x_2^{\kappa+1} = \frac{2}{9} + \frac{3}{9}x_1^\kappa - \frac{1}{9}x_3^\kappa$$

$$x_3^{\kappa+1} = \frac{-3}{7} + \frac{2}{7}x_1^\kappa - \frac{1}{7}x_2^\kappa$$

Εκτελούμε τις επαναληπτικές αυτές σχέσεις!!

Λύση

5.2.2 Μέθοδος Gauss-Seidel

Η επαναληπτική μέθοδος Gauss-Seidel λειτουργεί με βάση την μέθοδο Jacobi, όμως με βελτιωμένο ρυθμό σύγκλισης. Επομένως, η *Σχέση 9* παίρνει την πιο κάτω μορφή

$$x_i^{k+1} = \frac{1}{a_{ii}} \left(b_i - \sum_{j=1}^{j-1} a_{ij} \cdot x_j^{k+1} - \sum_{j=i+1}^{n} a_{ij} \cdot x_j^{k} \right) \tag{13}$$

με λίγα λόγια, όποιο x_i υπολογίζουμε το χρησιμοποιούμε στην επόμενη προσέγγιση x_{i+1}!

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Ορίζω τις αρχικές τιμές.

Βήμα 2. Εφαρμόζω την επαναληπτική σχέση του συστήματος (*Σχέση 10*)

Βήμα 3. Εφαρμόζω το κριτήριο σύγκλισης,

$$\mid x_i^{k+1} - x_i^{k} \mid \leq \varepsilon$$

Παράδειγμα 15

Πιο κάτω, δίνεται ο επαυξημένος πίνακας γραμμικού συστήματος. Φτιάξτε ένα πρόγραμμα, το οποίο θα υπολογίζει την λύση του συστήματος με την μέθοδο Gauss-Seidel.

$$\left[\begin{array}{ccc|c} 5 & -2 & 3 & -1 \\ -3 & 9 & 1 & 2 \\ 2 & -1 & -7 & 3 \end{array}\right]$$

Αρχικά υπολογίζουμε την επαναληπτική σχέση απομονώνοντας το x_1, x_2 και x_3.

$$x_1^{\kappa+1} = \tfrac{-1}{5} + \tfrac{2}{5}x_2^{\kappa} - \tfrac{3}{5}x_3^{\kappa}$$

$$x_2^{\kappa+1} = \tfrac{2}{9} + \tfrac{3}{9}x_1^{\kappa+1} - \tfrac{1}{9}x_3^{\kappa}$$

$$x_3^{\kappa+1} = \tfrac{-3}{7} + \tfrac{2}{7}x_1^{\kappa+1} - \tfrac{1}{7}x_2^{\kappa+1}$$

Εκτελούμε τις επαναληπτικές αυτές σχέσεις!!

Λύση

6 Monte Carlo Integrals

- Hit or Miss
- Crude Method (1-dim and n-dim)

6.1 Hit or Miss

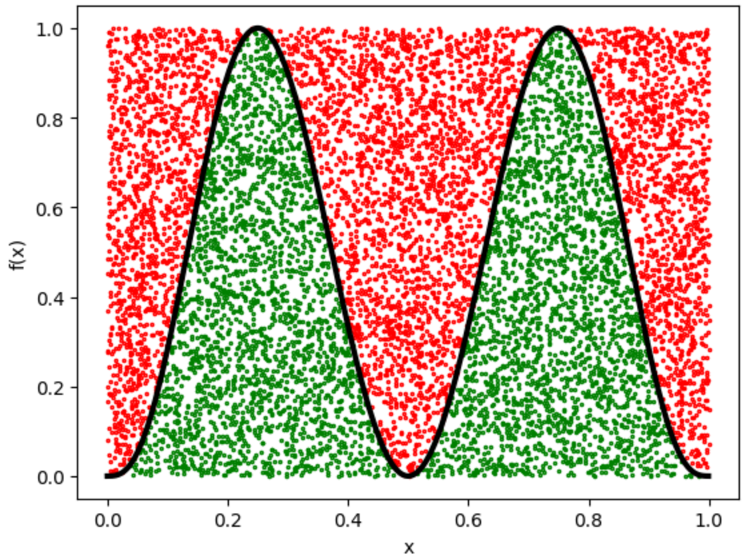


Figure 1: Illustration of the Hit or Miss Monte Carlo method

Εικόνα

Η πιθανότητα ένα τυχαίο σημείο να είναι εντός του επιθυμητού χώρου είναι

$$P_{\text{hit}} = \frac{\#\text{hit}}{N} \tag{14}$$

όπου N είναι ο αριθμός των επαναλήψεων.

Θα πρέπει να απαντήσουμε σε δύο βασικά ερωτήματα: Ποιο είναι το κριτήριο *hit*; Ποιο είναι το πεδίο ορισμού των τυχαίων αριθμών;

Το κριτήριο επιτυχίας (hit) αναμένουμε να είναι, για $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$,

$$w_i \leq f(x_i, y_i), \quad \text{με} \quad R = [x_{\min}, x_{\max}] \times [y_{\min}, y_{\max}]$$

ή οποιοδήποτε κριτήριο εξασφαλίζει την περιοχή που θέλω!
όπου

$$x \sim \text{Unif}(x_{\min}, x_{\max}), \quad y \sim \text{Unif}(y_{\min}, y_{\max}), \quad w \sim \text{Unif}(f_{\min}, f_{\max})$$

Επομένως, για τον υπολογισμό του ολοκληρώματος

$$\iint_R f(x,y)\,dS,$$

υπολογίζουμε την ποσότητα

$$I = V_{\text{space}} \cdot P_{\text{hit}},$$

όπου ο όγκος του χώρου είναι

$$V_{\text{space}} = (x_{\max} - x_{\min}) \cdot (y_{\max} - y_{\min}) \cdot (f_{\max} - f_{\min}).$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Εύρεση του χώρου V_{space}.

Βήμα 2. Παραγωγή N τυχαίων αριθμών:

$$x \sim \text{Unif}(x_{\min}, x_{\max})$$
$$y \sim \text{Unif}(y_{\min}, y_{\max})$$
$$w \sim \text{Unif}(f_{\min}, f_{\max})$$

Βήμα 3. Για κάθε $i = 1, \dots, N$, αν

$$w_i \leq f(x_i, y_i),$$

τότε αυξάνουμε τον μετρητή των hits:

$$\text{hit} = \text{hit} + 1$$

Βήμα 4. Υπολογισμός των εξής:

$$P_{\text{hit}} = \frac{\text{hit}}{N},$$
$$I = P_{\text{hit}} \cdot V_{\text{space}},$$
$$\delta I = \frac{V_{\text{space}}}{\sqrt{N}} \sqrt{P_{\text{hit}} - P_{\text{hit}}^2}.$$

Παράδειγμα 16

Υπολογίστε το πιο κάτω ολοκλήρωμα με την μέθοδο Hit or Miss.

$$\int_1^4 \frac{(sin(\sqrt{x}+1) \cdot e^{\sqrt{x}}}{\sqrt{x}}\,dx$$

Λύση:

$$V_{space} = f_{max} \cdot (b-a) = f(1) \cdot (4-1)$$
$$x \sim Unif\ \ (1,4)$$
$$y \sim Unif\ \ (0, f_{max})$$
$$y_i \leq f(x_i) \quad \rightarrow hit!$$

Λύση

Παράδειγμα 17

Υπολογίστε τον όγκο ενός κύβου με σφαιρική οπή ακτίνας $r = 5$, χρησιμοποιώντας τη μέθοδο Hit or Miss.

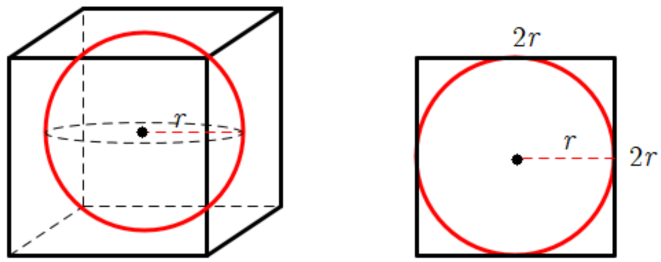
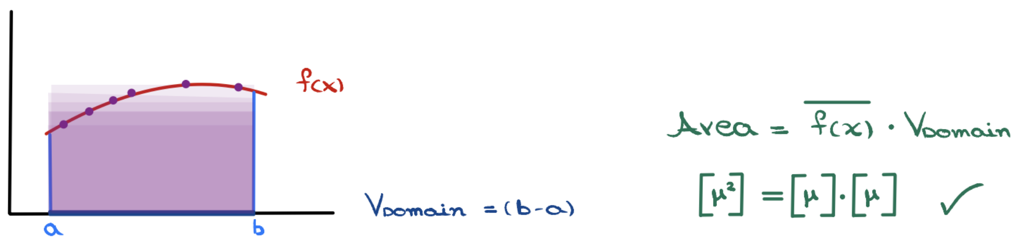


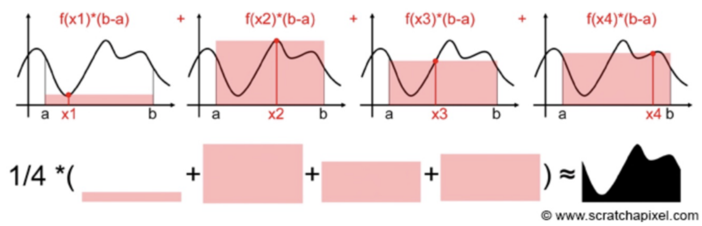
Figure 2: Κύβος με σφαιρική οπή ακτίνας 5

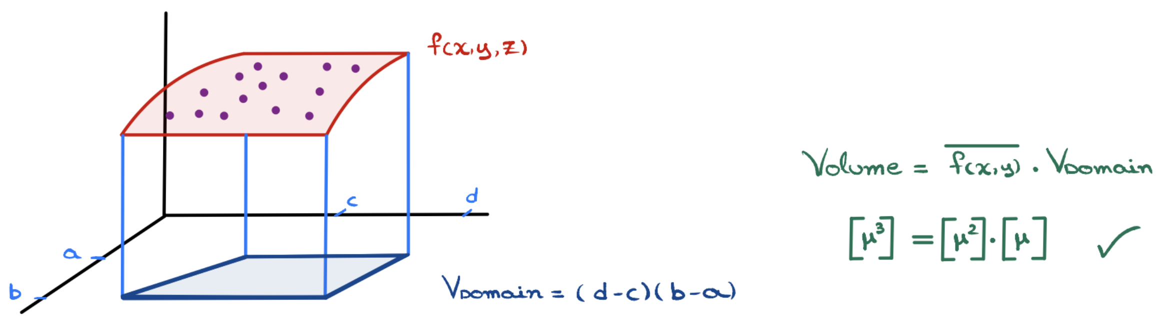
Λύση

Προσοχή: Το βασικό πλεονέκτημα αυτής της μεθόδου είναι ότι **δεν χρειάζεται να γνωρίζουμε αναλυτικά τη συνάρτηση****!

6.2 Crude method







6.2.1 Crude 1-dim

Σε αντίθεση με την μέθοδο hit or miss, στην μέθοδο Crude, χρειάζεται να υπολογίσουμε μόνο την μέση τιμή της συνάρτησης (μέσο ύψος) στο domain που μας ενδιαφέρει και να το πολλαπλασιάσουμε επί το μήκος του domain!

$$I = \overline{f(x)} \cdot V_{Domain}$$

όπου,

$$V_{Domain} = (x_{max} - x_{min})$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Εύρεση χώρου V_{Domain}

Βήμα 2. Παράγουμε N - τυχαίους αριθμούς:

$$x \sim Unif\ \ (x_{min}, x_{max})$$

Βήμα 3. Υπολογίζουμε τα ακόλουθα,

$$I = \overline{f(x_i)} \cdot V_{Domain}$$

$$\delta I = \frac{V_{Domain}}{\sqrt{N}} \cdot \sigma_f$$

Παράδειγμα 18

Υπολογίστε το πιο κάτω ολοκλήρωμα με την μέθοδο Crude

$$\int_1^4 \frac{(sin(\sqrt{x}+1)\cdot e^{\sqrt{x}}}{\sqrt{x}}$$

Λύση:

$$V_{domain} = (b-a) = (4-1)$$
$$x \sim Unif\ \ (1,4)$$

Λύση

6.2.2 Crude n-dim

Ομοίως μπορούμε να γενικεύσουμε την μέθοδο αυτή σε n-διάσταση!
Για $f(x,y) : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$,

$$I = \overline{f(x,y)} \cdot V_{Domain}$$

όπου

$$V_{Domain} = (x_{max} - x_{min}) \cdot (y_{max} - y_{min})$$

! **Αλγόριθμος:**

Βήμα 1. Εύρεση χώρου V_{Domain}

Βήμα 2. Παράγουμε N - τυχαίους αριθμούς:

$$x \sim Unif\ \ (x_{min}, x_{max})$$

$$y \sim Unif\ \ (y_{min}, y_{max})$$

Βήμα 3. Υπολογίζουμε τα ακόλουθα,

$$I = \overline{f(x_i, y_i)} \cdot V_{Domain}$$

$$\delta I = \frac{V_{Domain}}{\sqrt{N}} \cdot \sigma_f$$

Προσοχή: Ομοίως, μπορούμε να επεκτείνουμε σε οποιαδήποτε διάσταση!!

Παράδειγμα 19

Υπολογίστε το πιο κάτω ολοκλήρωμα με την μέθοδο Crude

$$\int_0^1 \int_{-1}^4 \int_2^3 z^3 - 4x^2y \cdot dxdydz$$

Λύση:

$$V_{domain} = (f-e)(d-c)(b-a) = (1-0)(4+1)(3-2)$$
$$x \sim Unif\ \ (2,3)$$
$$y \sim Unif\ \ (-1,4)$$
$$z \sim Unif\ \ (0,1)$$

Λύση