Metody numeryczne / Piotr Krzyżanowski. – Wydanie I. – Warszawa, 2024

Spis treści

Od autora **V**

Spis przypomnień **7**

Spis definicji **9**

Spis twierdzeń **11**

Spis wstawek **15**

Spis podstawowych oznaczeń **17**

I. Fundamenty

Rozdział 1. Czym zajmują się metody numeryczne? **21**
1.1. Zadanie obliczeniowe 23
1.2. Cel metod numerycznych 25

Rozdział 2. Oprogramowanie dla obliczeń numerycznych **29**
2.1. MATLAB i GNU Octave 31
2.1.1. Podstawy 32
2.1.2. Pierwsze obliczenia 34
2.1.3. Skrypty i funkcje 37
2.2. Julia 38
2.2.1. Podstawy 39
2.2.2. Pierwsze obliczenia 40
2.2.3. Skrypty i funkcje 43
2.3. Python: moduły NumPy i SciPy 45
2.3.1. Podstawy 46
2.3.2. Pierwsze obliczenia 47
2.3.3. Skrypty i funkcje 50
2.4. Uwagi i uzupełnienia 52
2.5. Zadania 53

Rozdział 3. Komputer i obliczenia na liczbach rzeczywistych **55**
3.1. Zapis zmiennopozycyjny liczb rzeczywistych 55
3.2. Standard arytmetyki zmiennopozycyjnej IEEE 754 57
3.2.1. Liczby maszynowe 58
3.2.2. Operacje arytmetyczne 68
3.2.3. Różnice między arytmetyką dokładną a arytmetyką 69

3.2.4. Formaty liczb maszynowych nieobjęte standardem IEEE 754 72
3.3. Komputer 74
3.3.1. Procesor 74
3.3.2. Pamięć 76
3.4. W skrócie 78
3.5. Uwagi i uzupełnienia 79
3.6. Zadania 79
3.7. Sprawdźmy to w praktyce. Różnicowa aproksymacja pochodnej 81

Rozdział 4. Błędy w zadaniach obliczeniowych 85
4.1. Błąd bezwzględny i błąd względny 86
4.2. Uwarunkowanie zadania 87
4.3. Błąd i uwarunkowanie zadania po składowych 97
4.4. Uwarunkowanie złożenia 105
4.5. W skrócie 108
4.6. Uwagi i uzupełnienia 109
4.7. Zadania 109
4.8. Sprawdźmy to w praktyce. Czułość układu elektrycznego na zmianę parametrów 112

Rozdział 5. Jakość algorytmów numerycznych 117
5.1. Algorytm numeryczny 117
5.2. Błąd w przód i błąd wstecz 119
5.3. Koszt obliczeniowy i pamięciowy algorytmu 121
5.3.1. Złożoność obliczeniowa zadania 129
5.3.2. Koszt algorytmów rekurencyjnych 130
5.3.3. Ograniczenia używanego modelu kosztu obliczeń 134
5.4. Zachowanie się algorytmu w arytmetyce fl 139
5.4.1 Numeryczna poprawność 139
5.4.2. Numeryczna stabilność 147
5.4.3. Praktyczne wskazówki 151
5.5. W skrócie 157
5.6. Uwagi i uzupełnienia 158
5.7. Zadania 158

II. Algebra liniowa

Rozdział 6. Metody bezpośrednie dla układów równań liniowych 165
6.1. Jak tego nie robić? 166
6.2. Proste układy równań liniowych 167
6.2.1. Układ z macierzą trójkątną 167
6.2.2. Układ z macierzą ortogonalną 170
6.3. Rozkłady macierzy 171
6.3.1. Rozkład LU 171
6.3.2. Rozkład LU z osiowaniem 177
6.3.3. Rozkład QR 180
6.4. Rozkłady macierzy specjalnych 180

6.4.1. Macierz trójdiagonalna 180
6.4.2. Macierz symetryczna i dodatnio określona 182
6.5. Uwarunkowanie układu równań liniowych 186
6.6. Reszta, a błąd rozwiązania 191
6.7. Numeryczna poprawność algorytmów opartych na rozkładach 194
6.7.1. Rozkład QR 196
6.7.2. Rozkład LU 197
6.8. W skrócie 201
6.9. Software 202
6.10. Uwagi i uzupełnienia 202
6.11. Zadania 202
6.12. Sprawdźmy to w praktyce. Po awarii nad rzeką 206

Rozdział 7. Liniowe zadanie najmniejszych kwadratów 209
7.1. Proste zadanie najmniejszych kwadratów 211
7.2. Rozwiązywanie LZNK przez rozkład QR 211
7.3. Metoda Householdera 213
7.3.1. Wyznaczenie rozkładu QR metodą Householdera 216
7.3.2. Koszt rozkładu QR metodą Householdera 218
7.4. Sprowadzenie LZNK do układu równań normalnych 219
7.5. Uwarunkowanie LZNK 221
7.6. Reszta, a błąd rozwiązania 223
7.7. W skrócie 224
7.8. Software 225
7.9. Uwagi i uzupełnienia 225
7.10. Zadania 226
7.11. Sprawdźmy to w praktyce. Panorama 229

Rozdział 8. Symetryczne zagadnienie własne 233
8.1. Wyznaczanie pojedynczej pary własnej 235
8.1.1. Metoda potęgowa 235
8.1.2. Iloraz Rayleigha 239
8.1.3. Transformacje widma 240
8.1.4. Odwrotna metoda potęgowa 241
8.1.5. Odwrotna metoda potęgowa z przesunięciem 242
8.2. Uwarunkowanie wartości własnych 245
8.3. Reszta, a błąd wstecz 248
8.4. Kryteria stopu 249
8.5. Pełne zagadnienie własne 252
8.5.1. Sprowadzenie macierzy do prostszej postaci 252
8.5.2. Metoda „dziel i rządź" dla trójdiagonalnej macierzy symetrycznej 254
8.5.3. Wyznaczanie wektorów i wartości własnych modyfikacji rzędu jeden macierzy diagonalnej 256
8.5.4. Metoda QR 260
8.6. Lokalizacja wartości własnych 262
8.7. W skrócie 264
8.8. Software 265

8.9. Uwagi i uzupełnienia 265
8.10. Zadania 265
8.11. Sprawdźmy to w praktyce. Jak zmienił się cały świat 268

Rozdział 9. Rozkład SVD 275
9.1. Własności 275
9.2. Przykłady zastosowań 283
9.2.1. Nieregularne liniowe zadanie najmniejszych kwadratów 284
9.3. Wyznaczanie rozkładu SVD 287
9.3.1. Sprowadzenie do postaci dwudiagonalnej 287
9.3.2. Metoda „dziel i rządź" dla macierzy dwudiagonalnej 288
9.4. W skrócie 291
9.5. Software 292
9.6. Uwagi i uzupełnienia 292
9.7. Zadania 292
9.8. Sprawdźmy to w praktyce. PCA na przykładzie LSA 294

Rozdział 10. Metody iteracyjne dla układów równań liniowych 301
10.1. Macierze rozrzedzone 301
10.1.1. Reprezentacja macierzy rozrzedzonych 302
10.2. Metody iteracyjne oparte na rozszczepieniu macierzy 305
10.2.1. Klasyczne metody rozszczepienia 306
10.3. Metody przestrzeni Krylowa 313
10.3.1. Metoda CG (sprzężonych gradientów) 316
10.3.2. Metoda GMRES 321
10.4. Ściskanie macierzy 323
10.4.1. Proste operatory ściskające 324
10.4.2. Ściskanie dla CG: metoda PCG 329
10.5. Kryteria stopu metod iteracyjnych 330
10.6. W skrócie 331
10.7. Software 331
10.8. Uwagi i uzupełnienia 332
10.9. Zadania 332
10.10. Sprawdźmy to w praktyce. Miejska sieć gazowa 336

III. Aproksymacja funkcji i zadania pokrewne

Rozdział 11. Aproksymacja wielomianami 343
11.1. Istnienie elementu najlepszej aproksymacji 346
11.2. Najlepsza aproksymacja średniokwadratowa 351
11.2.1. Uwarunkowanie zadania najlepszej aproksymacji średniokwadratowej 354
11.2.2. Wyznaczanie wielomianu najlepszej aproksymacji średniokwadratowej 357
11.2.3. Wielomiany ortogonalne 357
11.2.4. Przypadek dyskretnej aproksymacji średniokwadratowej 362
11.3. Najlepsza aproksymacja jednostajna 363

11.3.1. Charakteryzacja wielomianu najlepszej aproksymacji jednostajnej przez alternans 364
11.3.2. Wyznaczenie wielomianu aproksymacji jednostajnej 366
11.3.3. Wielomiany Czebyszewa i ich własności 366
11.4. Interpolacja Lagrange'a 369
11.4.1. Algorytm różnic dzielonych 373
11.4.2. Błąd interpolacji 378
11.4.3. Najlepsza aproksymacja jednostajna, a interpolacja 381
11.4.4. Uwarunkowanie zadania interpolacji 388
11.5. W skrócie 390
11.6. Software 390
11.7. Uwagi i uzupełnienia 391
11.8. Zadania 391
11.9. Sprawdźmy to w praktyce. Wielomianowy wytrych 395

Rozdział 12. Aproksymacja splajnami 403
12.1. Splajn, czyli funkcja sklejana z wielomianów 403
12.1.1. Reprezentacja splajnu w postaci PP 405
12.2. Reprezentacja splajnu w B-bazie 405
12.2.1. Własności B-splajnów 406
12.2.2. Algorytm de Boora 409
12.3. Interpolacja splajnowa 411
12.3.1. Interpolacja splajnem liniowym 412
12.3.2. Interpolacja splajnem kubicznym 417
12.3.3. Optymalność splajnów interpolacyjnych 425
12.4. Splajnowa aproksymacja średniokwadratowa 427
12.4.1. Przypadek dyskretnej aproksymacji średniokwadratowej 430
12.5. W skrócie 431
12.6. Software 431
12.7. Uwagi i uzupełnienia 432
12.8. Zadania 432
12.9. Sprawdźmy to w praktyce. Galeria aproksymacji 434

Rozdział 13. Całkowanie 447
13.1. Proste kwadratury interpolacyjne 448
13.1.1. Błąd kwadratur interpolacyjnych 450
13.1.2. Kwadratury Gaussa 452
13.2. Kwadratury złożone 454
13.2.1. Błąd kwadratur złożonych 455
13.2.2. Kwadratury Romberga 458
13.3. Uwarunkowanie zadania całkowania 463
13.4. W skrócie 463
13.5. Software 464
13.6. Uwagi i uzupełnienia 464
13.7. Zadania 464
13.8. Sprawdźmy to w praktyce. Jak często brać tabletkę? 467

Rozdział 14. Równania nieliniowe **471**
14.1. Metoda bisekcji dla równania skalarnego 473
14.2. Metoda Newtona 478
14.2.1. Modyfikacje nieużywające pochodnej 483
14.3. Wielowymiarowa metoda Newtona 486
14.3.1. Implementacja 490
14.3.2. Modyfikacje obniżające koszt iteracji 490
14.3.3. Modyfikacje nieużywające pochodnej 491
14.4. Zadanie punktu stałego, a równanie nieliniowe 492
14.4.1. Metoda Banacha (iteracja prosta) 493
14.5. Uwarunkowanie równania nieliniowego 497
14.6. Kryteria stopu. Reszta, a błąd 500
14.7. W skrócie 501
14.8. Software 502
14.9. Uwagi i uzupełnienia 502
14.10. Zadania 503
14.11. Sprawdźmy to w praktyce. Dializator 506

Rozdział 15. Optymalizacja **509**
15.1. Metoda Newtona 510
15.1.1. Implementacja 512
15.1.2. Modyfikacje obniżające koszt iteracji 512
15.1.3. Modyfikacje ograniczające użycie pochodnych 513
15.2. Metoda spadku po gradiencie 514
15.2.1. Wybór długości kroku 517
15.3. Uwarunkowanie zadania minimalizacji 519
15.4. Kryteria stopu. Norma gradientu, a błąd 520
15.5. Nieliniowe zadanie najmniejszych kwadratów 522
15.5.1. Metoda Gaussa-Newtona 523
15.6. W skrócie 524
15.7. Software 525
15.8. Uwagi i uzupełnienia 525
15.9. Zadania 526
15.10. Sprawdźmy to w praktyce. Gdzie ja jestem? 527

Bibliografia **531**

Skorowidz **535**

oprac. BPK