NUMEERISET MENETELMÄT JA C-KIELI

Kevät 2014

Matematiikan ja tilastotieteen laitos, Helsingin yliopisto

Matti Vuorinen, vuorinen@utu.fi

Luennot: ma 16-18, ti 8-10

Harjoitukset: ti 10-12, Mikroluokka
Matti Vuorinen, vuorinen@utu.fi

Materiaali saatavilla kurssin kotisivulla https://wiki.helsinki.fi/pages/viewpage.action?pageId=113250812

http://wiki.helsinki.fi/pages/viewpage.action?pageId=70229823

File: koko14.tex, printed: 2014-1-3, 11.08

JOHDANTO

Tämän kurssin päätavoitteena on harjaannuttaa osallistujat käyttämään C/C++ -ohjelmointikieliä numeerisessa laskennassa. Luennot pohjautuvat pääosin teokseen

(NR) Press et. al: Numerical Recipes in C++ 2nd ed.

Cambridge Univ. Press 2002, jonka oheismateriaalina on esimerkkikirja ja CD-ROM. Tämä kokeellisen numeriikan tuhti tietopaketti on saavuttanut suurta suosiota, koska kattavuudeltaan vastaavia kilpailijoita ei juuri ole. Käytämme lähinnä em. kirjaston uudempia C++ -versioita.

Tekijänoikeus rajoittaa tämän ja muiden kaupallisten ohjelmien käyttöä oppimateriaalina. Marraskuussa 2001 julkistettiin C-kielinen GSL(GNU Scientific Library)-kirjasto, jonka käyttö on vapaata opetustarkoituksiin ns. GNU-lisenssin mukaisesti. Laskuharjoitusten ratkaisut voi tehdä myös GSL:n avulla jos pitää sitä parempana kuin NRC:tä.

C++/C-kielen opiskelu kannattaa, koska

• C-kieltä osaaville matemaatikkoille on työmarkkinoilla kysyntää

• NR:n ja GSL:n avulla opitaan matemaattista mallintamista ja ohjelman kehitystä tavalla, joka on Windows ja UNIX-yhteensopiva, mikä jo sinänsä on hyödyllistä,

• C-kielelle on käyttöä kurssin jälkeenkin.

Kurssin www-sivulle tulevat viikottain laskuharjoitustehtävät, kurssitiedotteet, malliratkaisut jne. Laskuharjoitustehtävän voi monesti ratkaista muokkaamalla luentojen esimerkkiohjelmia.

Käytämme lähinnä GNU-kääntäjiä g++/gcc (Linux). Käyrien ja pintojen piirtoon käytämme gnuplot-julkisohjelmaa.

Helsinki 1.1. 2012 Matti Vuorinen vuorinen@utu.fi

Sisältö

Tämä jaottelu on NR:n mukainen. Osa lukujen 11-16 materiaalista voi jäädä pois, luettelo on alustava.

Huom. Luentojen osana olevat C/C++-ohjelmat (www-sivulla paketti myexamples.zip) on testattu gcc-kääntäjällä ja gnuplotilla Linux-ympäristössä seuraavilla versioilla:

```
gcc version 4.2.4 (Ubuntu 4.2.4-1ubuntu4)
```

```
        G N U P L O T
        Version 4.2 patchlevel 2
        last modified 31 Aug 2007
        System: Linux 2.6.24-24-server
```

Vanhojen kurssien www-sivulta löytyy demo-ohjelmia ajettavina cgi-skripteinä. Gnuplotista on v. 2007 ilmestynyt versio 4.2. GSL:stä on v. 2009 ilmestynyt versio 1.13.

NR:n vanhempi versio on saatavissa osoitteessa:

`http://www.fizyka.umk.pl/nrbook/bookcpdf.html`

GSL:n osalta kannattaa käyttää webistä löytyvää materiaalia, ks. esim.

`http://www.gnu.org/software/gsl/`

1 KOKEELLINEN NUMERIIKKA JA C-KIELI

Tämän luvun tarkoituksena on luoda yleiskatsaus eräisiin numeriikan peruskysymyksiin ja antaa esimerkkejä C-kielen käytöstä numeerisissa sovelluksissa. Samalla kerrataan C/C++–kielen perusrakenteita jatkoa silmällä pitäen. Lisäksi esittelemme muutamien apuohjelmien käyttöä, kuten kuvaajien piirtoa gnuplot-ohjelman avulla.

Aluksi pari huomautusta kurssia tukevasta kirjallisuudesta ja ohjelmistoista. Glasseyn kirja [G] on selkeä johdatus C-kielen numeerisiin sovelluksiin. Erityisesti [G]:n kaksi ensimmäistä lukua ovat erinomainen johdatus [NR]:n vaativampiin ohjelmiin. C++-kielen osalta vastaava teos on Yang [Y]. Kurssin kotisivulle on koottu mm. ohjelmointiin ja numeriikkaan liittyviä linkkejä.

Käsikirja [AS] on erittäin hyödyllinen lähdeteos kokeelliselle numeriikalle. Taustakirjallisuudesta on tehty www-sivulle laitettu luettelo, johon myös eo. viittaukset kohdistuvat.

1.1. Tiedostojen nimeäminen. Koska kurssilla luotavien tiedostojen määrä saattaa nousta satoihin, on tärkeää omaksua systemaattiset ohjelmointitottumukset. Tiedostojen nimeämisessä kannattaa noudattaa seuraavia vinkkejä. Tiedostolle annetaan lyhyt kuvaava nimi, esimerkiksi:

`h011.c` harj. 1 tehtävän 1 ratkaisu
`h011.dat` harj. 1 tehtävä 1, tuotettu data

Jatkossa käytetään vain tekstitiedostoja. Kunkin tekstitiedoston alkuun ja loppuun olisi syytä laittaa tiedoston nimi, jolloin tiedostojen järjestyksen ylläpito on helpompaa, esimerkiksi:

```
/* FILE: h011.c begins. */
..
..   tiedoston sis\"alt\"o
..
/* FILE: h011.c ends. */
```

Vinkki: Tee tiedosto `beg.cpp`, jossa on valmiina alku/loppukommentit. Jatkossa se on helppo liittää mukaan uuteen tiedostoon.

```
/* FILE: beg.cpp begins */
/* FILE: beg.cpp ends */
```

Laajempi muoto tiedostosta `beg.cpp`, jossa mukana mm. usein tarvittavat include/otsikkotiedostot, on tämän luvun lopussa.

1.2. Liukuluvut. Reaalilukujen esitys tietokoneen muistissa tapahtuu koneesta ja ohjelmasta riippuvalla tarkkuudella binäärilukujen avulla. Eri kantajärjestelmien välinen konversio on esitetty algebran kurssilla (ks. myös [AS, s. 1012]). Reaalilukujen esitystä tietokoneessa kutsutaan *liukulukuesitykseksi* (floating point representation). Periaatteessa liukulukuesitys on samanlainen kuin ns. *tieteellinen merkintätapa,* jossa esim lukuja 297.2 ja -0.00029 merkitään $2.972 \cdot 10^2$ ja $-2.9 \cdot 10^{-4}$ ja $637000 = 6.370 \cdot 10^5$ (jos 4 merkitsevää numeroa). Tieteellinen merkintätapa koostuu siis seuraavista osista: a) etumerkki b) mantissa (välillä $[1, 10)$) c) eksponenttiosa, ja tässä mantissan pituus määräytyy merkitsevien numeroiden mukaan.

Liukulukuesityksen tarkkuus määräytyy mantissan pituudesta, joten siinä yleensä aina on virhettä. Liukulukuja on vain äärellinen määrä. Positiivisten liukulukujen joukossa on siis suurin liukuluku ja myös pienin nollaa suurempi liukuluku. Jos laskutoimituksen tulos johtaisi liukulukualueen ulkopuolelle, joudutaan virhetilanteeseen, jota kutsutaan ylivuodoksi tai alivuodoksi tilanteen mukaan. Liukuluvut eivät ole jakautuneet tasaisesti äärirajojen väliin, vaan itseisarvoltaan pienet ovat tiheämmässä kuin itseisarvoltaan suuret. Liukulukuaritmetiikaan kuuluvat yhteen–,vähennys–, jako–, kertolasku, loogiset vertailuoperaatiot (esim. $a > b$) ja eräät muut reaalilukujen operaatiot. Liukulukuaritmetiikassa pätevät samankaltaiset laskusäännöt kuin reaaliluvuille, joten reaalilukujen laskusääntöjä voidaan käyttää kunhan muistetaan esitystarkkuudesta johtuvat rajoitukset. Periaatteelliselta kannalta on kuitenkin tärkeää

huomata, että eräin osin syntyy eroja. On syytä varautua virheisiin mm. analysoimalla laskennan tuloksia, ja sikäli kun mahdollista, ryhtyä tarpeellisiin toimiin pyöristysvirheiden välttämiseksi. Esim. käskyt `a= 1/3; b=1.0/3;` voivat tuottaa eri arvot a:lle ja b:lle. Joitakin hyödyllisiä vinkkejä esitetään myöhemmin. Kattava tietopaketti liukuluvuista löytyy osoitteesta

`http://www.validlab.com/goldberg/paper.pdf` .

1.3. Pyöristyksen sivuvaikutuksia. Reaaliluvuille $b, c > 0$ pätee: $(b + c)/2 \leq \max\{b, c\}$. Pyöristys kolmeen desimaaliin antaa liukuluvuille $C = 0.982$, $B = 0.984$ summaksi $B + C = 1.97$ ja keskiarvoksi $(B + C)/2 = 0.985$. Siis liukulukuaritmetiikassa voi olla $(B + C)/2 > \max\{B, C\}$! Tämän ei-toivotun sivuvaikutuksen välttämiseksi on syytä käyttää parempaa laskutapaa: $B + \frac{1}{2}(C - B)$.

1.4. Kone–epsilon. Kuten jo yllä kohdassa 1.2 todettiin, liukulukuesityksellä reaaliluku voidaan esittää kone-esityksestä riippuvalla tarkkuudella. Ns. *kone–epsilon* mittaa tätä tarkkuutta. Kone–epsilon meps on 2^{-p} jos $c < c + 2^{-p}$ pätee liukulukuaritmetiikassa mutta $c < c + 2^{-p-1}$ ei päde ja p on positiivinen kokonaisluku sekä (tavallisesti) $c = 1$.

```
/* FILE: mymeps1.cpp  begins */
/* g++ mymeps1.cpp -o a -lm
Program finds out machine epsilon. CPU dependent machine epsilon
can be considered as an estimate of the minimum error made by
computer in calculus operations.
*/

#include <stdlib.h>
#include <cstdio>
#include <ctime>
#include <climits>
#include <cmath>
#include <values.h>

int main()
{
```

```
  int c = 1, p = 1;
  float x = 1.0;
  double xd = 1.0;
  printf("\n MACHINE EPSILON 1 = ");
  while (c + pow(2.0, -p) > c)
    p++;
  printf("  %16.6E  = 2^(-%3d) \n", pow(2, 1 - p), p - 1);
  p = 1;
  printf("\n MACHINE EPSILON 2 = ");
  while (x + (float) pow(2.0, -p) > x)
    p++;
  printf("  %16.6E  = 2^(-%3d) \n", pow(2.0, 1 - p), p - 1);
  printf("\n MACHINE EPSILON 3 = ");
  p = 1;
  while (xd + pow(2.0, -p) > xd)
    p++;
  printf("  %16.6E  = 2^(-%3d) \n", pow(2.0, 1 - p), p - 1);
  printf
    ("\n FLT_EPSILON = %12.4E, DBL-EPSILON = %12.4E \n",
     FLT_EPSILON, DBL_EPSILON);
  printf("\n DBL_MIN = %12.4E  DBL_MAX = %12.4E \n",
         DBL_MIN, DBL_MAX);
  printf("\n FLT_MIN = %12.4E  FLT_MAX = %12.4E \n",
         FLT_MIN, FLT_MAX);
  return 0;
}
/* FILE: mymeps1.cpp  ends */

/* Output:

 MACHINE EPSILON 1 =       1.084202E-19  = 2^(- 63)
 MACHINE EPSILON 2 =       1.084202E-19  = 2^(- 63)
 MACHINE EPSILON 3 =       1.084202E-19  = 2^(- 63)
 FLT_EPSILON =   1.1921E-07, DBL-EPSILON =   2.2204E-16
 DBL_MIN =  2.2251E-308  DBL_MAX =  1.7977E+308
 FLT_MIN =   1.1755E-38  FLT_MAX =   3.4028E+38

*/
```

Ohjelman käännös tapahtuu esimerkiksi antamalla kommenteissa oleva komento.

Kone–epsilonia voidaan pitää jonkinlaisena arviona sille, kuinka suuri laskennan virhe vähintään on. Kone–epsilonin vaikutusta voi-

daan havainnollistaa myös taulukoimalla funktioita $\sin^2 x + \cos^2 x - 1$ ja $\text{asin}\,(\sin(x)) - x$ arvot välillä $(0, 1)$. Molemmat ovat matemaattisesti identtisesti nollia, mutta numeerisesti syntyy luokkaa 10^{-16} olevia poikkeamia. Luonnollisesti vastaavia testejä voidaan tehdä monille muillekin C-kielen tuntemille funktioille. Reaalilukuja esitetään C-kielessä tavallisesti tyyppiä `float` tai `double` olevilla muuttujilla. Laskentatarkkuus paranee `double`-tyyppisiä muuttujia käytettäessä, mutta ohjelman aika- ja tilavaatimukset yleensä kasvavat. Tällä kurssilla käytämme etupäässä `double`-tyyppisiä muuttujia.

1.5. NRC:n ohjelmat. Kirjan NR alussa, sivuilla 15-27, on hyödyllinen katsaus ohjelmissa noudatettaviin periaatteisiin. Ks. kurssimappi. Myös kurssin laskuharjoituksissa pyrimme seuraamaan kirjan suuntalinjoja tältä osin. Kirjan ohjelmiin voi parhaiten perehtyä tutkimalla ajokelpoisia pääohjelmia (vrt. erilliset ohjeet). Melkein kaikki ohjelmat käyttävät otsikkotiedostoja `nr.h` ja `nrutil.h`.

Laskuharjoituksissa tehtävät uudet määrittelyt on, jos tarpeen, laitettava omaan otsikkotiedostoonsa esim. `lh1.h`. Siinä tapauksessa, että teet omia viritelmiä kurssilla esiintyviin tiedostoihin niin muuta myös tiedostonimi. Jotta laskuharjoituksissa muiden olisi helpompi seurata ratkaisujasi, olisi parasta olla muokkaamatta NR:n/GSL:n otsikko- tms. tiedostoja tai ainakin nimetä ne uudelleen jos muutat niitä.

Yksinkertainen esimerkki NRC-ohjelmien käytöstä on seuraavassa. Alla ohjelman listaus ja tulostus. Huomaa alussa/lopussa olevat direktiivit.

```
/* FILE: mynrctst.cpp begins                    */
/*  g++ -Wall mynrctst.cpp -I../utils -o a -lm  */
/* A simple example of how to use NRC programs. */

#include <stdlib.h>
#include <cstdlib>
#include <cstdio>
```

```
#include "nr.h"
#include "nrutil.h"

int main()
{
  for (int j = 1; j <= 5; j++)
  {
    double x  = 0.2 * j;
    printf("log(Gamma( %6.4f )) = %12.5e \n", x, NR::gammln(x));
  }
  return 0;
}
/* FILE: mynrctst.cpp ends                                    */

log(Gamma( 0.2000 )) =  1.52406e+00
log(Gamma( 0.4000 )) =  7.96678e-01
log(Gamma( 0.6000 )) =  3.98234e-01
log(Gamma( 0.8000 )) =  1.52060e-01
log(Gamma( 1.0000 )) =  0.00000e+00
```

Unix:issa ohjelma voidaan kääntää usealla eri tavalla. Helpoin tapa on

`g++ -Wall mynrctst.cpp -I../utils -o a -lm .` ja ajo tapahtuu tavalliseen tapaan `./a .`

1.6. Ellipsin pinta-ala. Teemme pienen ohjelman, joka pyytää käyttäjältä ellipsin puoliakselit ja antaa vastaukseksi ellipsin pinta-alan.

```
/* FILE: myarea1.cpp begins                                   */
/* g++ myarea1.cpp -o a -lm */
/* Area of an ellipse  */

#include <cstdio>
#include <cmath>
#define PI M_PI                 /* defines PI 3.14159... */

double area(double a, double b)
{ return PI * a * b; }

int main()
{
  double semi1, semi2, ar;
```

```
  double area(double, double);
  int i, n;
  printf("How many ellipses? \n");
  scanf("%d", &n);
  for (i = 1; i <= n; i++)
  {
    printf("Ellipse No %2d : semiaxis1 = ? \n", i);
    scanf("%lf", &semi1);
    printf("Ellipse No %2d : semiaxis2 = ? \n", i);
    scanf("%lf", &semi2);
    ar = area(semi1, semi2);
    printf("Ellipse No %2d : Area = %16.5e\n", i, ar);
  }
  return 0;
}

/* FILE: myarea1.cpp ends                                    */
```

Ohjelman toiminta lienee luettavissa suoraan koodista.

1.7. C-kielen matemaattisia piirteitä. Edellä, kohdassa 1.6 käytettiin C-kielen tuntemaa vakiota M_PI, joka on header-tiedostossa `math.h` (C++: `cmath`). Alla on joukko sieltä löytyviä muita matemaattisia vakiota.

```
/* Constants rounded for 21 decimals. */
#define M_E         2.71828182845904523536
#define M_LOG2E     1.44269504088896340736
#define M_LOG10E    0.43429448190325182765l
#define M_LN2       0.69314718055994530942
#define M_LN10      2.30258509299404568402
#define M_PI        3.14159265358979323846
#define M_PI_2      1.57079632679489661923
#define M_PI_4      0.78539816339744830962
#define M_1_PI      0.31830988618379067154
#define M_2_PI      0.63661977236758134308
#define M_1_SQRTPI  0.56418958354775628695
#define M_2_SQRTPI  1.12837916709551257390
#define M_SQRT2     1.41421356237309504880
#define M_SQRT_2    0.70710678118654752440
```

C-kielen perusteoksista löytyy myös luetteloita käytettävissä olevista matemaattisista funktioista. Tavallisimmat matemaattiset funk-

tiot kuten sin, cos, exp, sinh sekä näiden käänteisfunktiot asin, acos, log, asinh on määritelty tiedostossa `math.h` (C++: `cmath`).

Satunnaislukuja voidaan generoida käyttäen C-kielen satunnaislukugeneraattoria `rand()`. Satunnaislukuja käytetään paljon mm. testidatan tuottamiseen tälläkin kurssilla. Alla muutamia esimerkkejä satunnaislukujen käytöstä. Näistä ensimmäinen simuloi nopanheittoa. Koska satunnaislukugeneraattori toimii deterministisesti, se tuottaa samoilla "alustuksilla" samat satunnaisluvut. Tavallisesti halutaan kuitenkin satunnaislukujen muuttuvan ohjelman eri ajokerroilla. Allaolevissa ohjelmissa tähän päästään alustamalla satunnaisgeneraattori systeemikellosta.

```
/* FILE: mygenrdm.cpp begins.          */
/*  g++ mygenrdm.cpp  -o a -lm -lnr   */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <climits>
using namespace std;

void Die_Casting()
{
  unsigned seed = time(NULL);
/* Generates a seed for the  random number
   generator using the system clock. */
  int i, j, freq[10];
  srand(seed);                  /* Initiates the generator */
  for (i = 0; i < 10; i++)
    freq[i] = 0;
  for (i = 0; i < 40; i++)
  {
    j = 1 + rand() % 6;
    printf("%3d", j);
    if (i == 20)
      printf("\n");
    freq[j]++;
```

```
  }
  printf("\n");
  for (i = 1; i <= 6; i++)
  {
    printf("%2d :", i);
    for (j = 1; j <= freq[i]; j++)
      printf("x");
    printf("\t : %3d\n", freq[i]);
  }
}

void Normalized_Rdm(int mi, int ma)
{
  unsigned seed = time(NULL);
  /* This generates a seed for the random number
     generator using system clock. */
  int i, j;
  srand(seed);                  /* This initiates the random number
                                   generator with the given seed. */
  printf("Prints normalized random numbers. r=random \n");
  printf("     Rint    rint in [%3d,%3d]   rfloat in [0,1] \n",
             mi,ma);
  for (i = 0; i < 6; i++)
  {
    j = rand();
    printf("%12d  %3d  %20.5f\n", j,
           (int) (mi + (j * 1.0 / RAND_MAX) * (ma - mi)),
           (float) ((j * 1.0 / RAND_MAX)));
  }
  printf("RAND_MAX= %d \n", RAND_MAX);
}

void GenRdm_xyPairs()
{
/* This program prints (x[i],y[i]) pairs, where
   x[i] < x[i+1]. Both x and y values are random numbers. */
  unsigned seed = time(NULL);
  /* This generates a seed for the random number
     generator using system clock. */
  int i;
  float s = 0.0;                /* x-values are accumulated in s */
  float x[11], y[11];
  for (i = 0; i < 11; i++)
  {
    x[i] = 0.0;
```

```
    y[i] = 0.0;
  }

  srand(seed);                  /* This initiates the random number
                                   generator with the given seed. */
  printf(" i       x        y \n");
  for (i = 0; i < 11; i++)
  {
    s += rand() * 1.0 / RAND_MAX;
    x[i] = s;
    y[i] = rand() * 1.0 / RAND_MAX;
    printf("%2d   %8.5f    %8.5f\n", i, x[i], y[i]);
  }
}

int main()
{
  Die_Casting();
  Normalized_Rdm(1, 99);
  GenRdm_xyPairs();
}
/* FILE: mygenrdm.cpp ends.                                    */

/* Output:

  2  3  2  1  5  4  6  2  6  5  1  4  6  4  1  5  4  2  5  3  1
  1  1  5  3  1  1  2  4  1  5  3  1  6  4  4  3  3  5  6
 1 :xxxxxxxxxx   :  10
 2 :xxxxx        :   5
 3 :xxxxxx       :   6
 4 :xxxxxxx      :   7
 5 :xxxxxxx      :   7
 6 :xxxxx        :   5
Prints normalized random numbers. r=random
     Rint    rint in [  1, 99]   rfloat in [0,1]
  1700129767   78               0.79168
  1806595916   83               0.84126
   563531767   26               0.26241
   884334330   41               0.41180
  1078927036   50               0.50241
   497360169   23               0.23160
RAND_MAX= 2147483647
 i       x        y
 0    0.79168     0.84126
 1    1.05410     0.41180
```

```
 2    1.55651     0.23160
(.........)
 9    5.19532     0.27466
10    6.12516     0.96904

 */
```

Edellä algoritmisesti tuotetut satunnaisluvut eivät ehkä ole satunnaislukuja todennäköisyysteorian mielessä mutta kuitenkin riittävän hyvä vastine niille tällä kurssilla.

1.8. Syöttö ja tulostus tiedostojen avulla. Edellä, kohdassa 1.6 ohjelma pyytää käyttäjältä syötteitä. Joskus voi olla edullista käyttää syötteen ja/tai tulostuksen uudelleen suuntaamista tiedostojen avulla. Yksinkertaisimmin se tapahtuu seuraavasti

`myarea1 < myarea1.inp > myarea1.aux,`

jolloin syöte luetaan tiedostosta area1.inp ja tulokset kirjoitetaan tiedostoon myarea1.aux. Tiedosto myarea1.inp voisi olla seuraava:

```
2
1.0
1.0
1.0
2.2
```

jolloin ylläoleva komento tuottaa seuraavan tiedoston myarea1.aux:

```
How many ellipses?
Ellipse No  1 : semiaxis1 = ?
Ellipse No  1 : semiaxis2 = ?
Ellipse No  1 : Area =      3.14159e+00
Ellipse No  2 : semiaxis1 = ?
Ellipse No  2 : semiaxis2 = ?
Ellipse No  2 : Area =      6.91150e+00
```

1.9. Kirjoittaminen tiedostoon. Tarkastelemme tällä kurssilla pelkästään tekstitiedostoja. Seuraava esimerkki osoittaa miten tiedostoon kirjoittaminen tapahtuu. Huomaa aputiedoston `wrthed.cpp` mukaanotto. Tiedoston otsikon kirjoittaminen `writeheader` on määritelty

siellä. `writeheader` kirjoittaa mm. päivämäärän ja kellonajan tiedoston alkuun.

```
// FILE: myex.cpp begins
#include <cstdlib>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <fstream>
#include <cmath>
#include <ctime>

#include "wrthed.cpp"

using namespace std;
const char *tabfile = "myex.dat";

int main()
{
  ofstream fp(tabfile); // create myex.dat
  if (!fp)
  {
    std::cerr<< "Error in myex.cpp: can't open file."<<endl;
    exit(1);
  }
  writeheader(fp, tabfile);
  for (int i=0;i<=10;i++)
    fp << 0.1*(double)i <<" "<<  sin(i*0.1)<<endl;
  fp<<"\nFILE: "<<tabfile<<" ends.";
  fp.close();
  cout<<"FILE: myex.dat written."<<endl;
  return 0;
}
// FILE: myex.cpp ends
```

Ohjelman `myex.cpp` tuottama tiedosto on seuraava:

```
FILE:  myex.dat  begins.  04- Jan.  2002  11.10:03
0 0
0.1 0.0998334
0.2 0.198669
(....)
0.9 0.783327
1 0.841471
```

```
FILE: myex.dat ends.
```

1.10. Matemaattinen mallintaminen. Matemaattisella mallintamisella tarkoitetaan reaalimaailman ilmiön kuvaamista sellaisessa matemaattisessa muodossa, josta tarkasteltavat suureet voidaan ratkaista joko eksaktisti tai likimääräisesti. Usein kysymyksessä on monivaiheinen prosessi, jossa osina ovat mm. numeerisen mallin muodostaminen ja ratkaiseminen. Tavallisesti malli kuvaa ko. ilmiötä puutteellisesti ja se sisältää yksinkertaistuksia. Numeerista mallia muodostettaessa tehdään lähes aina diskretointi tai approksimointi. Tällöin jatkuva muuttuja korvataan diskreetillä ja ääretöntä approksimoidaan äärellisellä . Seuraavassa on muutama asiaa valaiseva esimerkki:

(1) $\sum_{n=1}^{\infty} a_n = \lim_{p\to\infty} \sum_{n=1}^{p} a_n$; $\sum_{n=1}^{p}$ voidaan laskea

(2) $\int_a^b f(x)dx = \lim_{n\to\infty} \sum_{j=1}^{n} f(a + j\frac{b-a}{n}) \cdot \frac{b-a}{n}$; $\sum_{1}^{n}$ voidaan laskea

(3) $\prod_{j=1}^{\infty} b_j = \lim_{n\to\infty} \prod_{j=1}^{n} b_j$; $\prod_{1}^{n}$ voidaan laskea

Perusesimerkki jatkuvasta mallista on differentiaaliyhtälö. Ne ovat erilaisissa luonnontieteen ja tekniikan sovelluksissa varsin tavallisia. Niiden avulla voidaan mallintaa mm. monia fysiikan ja kemian ilmiöitä heittoliikkeestä radioaktiiviseen hajoamiseen. Differentiaaliyhtälön numeerinen ratkaisu puolestaan tapahtuu erilaisilla tarkoitukseen kehitetyillä diskretointimenettelyillä. Eräs ensimmäisiä menetelmiä oli differentiaaliyhtälöiden kurssista tuttu Eulerin menetelmä, joka nykyään on korvattu paljon tehokkaammilla menetelmillä.

1.11. Virhelähteistä. Numeerisen laskennan virheet johtuvat usean erilaisen virhetekijän yhteisvaikutuksesta, joita nyt tarkastelemme.

(1) *Mallivirheet*, Syy: yksinkertaistavat oletukset.

(2) *Menetelmävirheet:* Syy: numeerinen malli ratkaistaan äärellisellä määrällä laskutoimituksia:

-*katkaisuvirhe*: Korvataan ääretön summa äärellisellä $e^x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!} = \sum_{n=0}^{k} + R_{n+1}(x) \approx \sum_{n=0}^{k} \frac{x^n}{n!}$, kun $|R_{n+1}(x)|$ on pieni.
-*diskretointivirhe* Esim. $\int_0^1 = \sum f(x_i)\Delta x$.
(3) *Lähtöarvovirheet:* Esimerkiksi analysoitava data (kokeelliset mittaukset) on virheellinen.
(4) *Pyöristysvirheet:* Numeerisen mallin ratkaisu voi sisältää suuren määrän laskutoimituksia, joista kukin voi tuottaa (koneesta riippuvan) virheen $\Rightarrow$ virheiden kumuloituminen laskennan aikana.
(5) *Epästabiilit algoritmit:* Menetelmävirhe voi aiheutua siitä, että käytetään *epästabiilia* algoritmia.
(6) *Inhimilliset virheet:* Ohjelmointivirheet (esim.).
(7) *Jako nollalla* voi johtaa arvaamattomiin seurauksiin, kuten myös laskennan aikana tapahtuva "liukulukualueen rajojen ylitys", ts. yli- tai alivuoto.

1.12. Suhteellinen ja absoluuttinen virhe. Vektorin $x = (x_1, \ldots, x_n) \in R^n$ approksimaatiota merk. $\tilde{x} = (\tilde{x}_1, \ldots, \tilde{x}_n) \in R^n$. Approksimaation virhe on $v = x - \tilde{x}$ (tai $\tilde{x} - x$). *Virheen normi* $\|v\|$ voidaan laskea eri tavoin:

$$\begin{aligned} \|v\|_\infty &= \max\{|v_i| \,:\, 1 \le i \le n\} \\ \|v\|_1 &= \textstyle\sum_{i=1}^{n} |v_i| \\ \|v\|_2 &= (\textstyle\sum_{i=1}^{n} |v_i|^2)^{1/2}. \end{aligned} \tag{1}$$

Virhearvio: $\|x - \tilde{x}\| \le u$, u virhearvio. Jos $x \neq 0$ niin *suhteellinen virhe* on $\frac{\|x-\tilde{x}\|}{\|x\|}$. Tulos on ilmaistu $p\%$ tarkkuudella, jos suhteellinen virhe $< \frac{p}{100}$.
Tulos on ilmaistu tarkkuudella ε, jos $\|x - \tilde{x}\| \le \varepsilon$.

1.13. Merkitsevien numeroiden kumoutuminen. Samanmerkkisten lukujen vähennyslaskussa voi tapahtua merkitsevien numeroiden kumoutumista, joka olennaisesti huonontaa tarkkuutta. Seuraavas-

sa muutamia esimerkkejä, joissa matemaattisella identiteetillä voidaan torjua tarkkuuden huononemista.

(1) $\sqrt{x^2+1}-1 = \frac{x^2}{1+\sqrt{1+x^2}}$. Kun $x \sim 0$ on jälkimmäinen muoto parempi.

(2) $\tan(x) - \sin(x) = \frac{1}{2}x^3 + \frac{1}{8}x^5 + \frac{13}{240}x^7 + \cdots$. Jälkimmäinen muoto parempi kun $x \sim 0$.

(3) $ax^2 + bx + c = 0 \quad (a \neq 0,\ b^2 - 4ac \geq 0,\ b \neq 0)$

$$x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 - 4ac}}{2a}.$$

Haitallista kumoutumista voi esiintyä, jos $4ac << b^2$. Oikea laskutapa

$$q = -\frac{1}{2}(b + \mathrm{sgn}(b)\sqrt{b^2 - 4ac}) \ , \quad x_1 = \frac{q}{a},\ x_2 = \frac{c}{q}.$$

(4) Positiivisten lukujen $0 < x_1 < \ldots < x_n$ yhteenlasku on edullista tehdä suuruusjärjestyksessä

```
s=0; for (j=1;j<=n;j++) {s+=x[j];}
```

(5) Reaalilukujen $x_i, i = 1, ..., n$, varianssille s_n on kaava

$$s_n^2 = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2; \qquad \overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i.$$

Kirjallisuudessa käytetään joskus myös numeerisiin tarkoituksiin huonompaa, mutta matemaattisesti identtistä kaavaa

$$s_n^2 = \frac{1}{n-1}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \frac{1}{n}(\sum_{i=1}^{n} x_i)^2\right) .$$

Edellä oleviin esimerkkeihin viitaten voidaan todeta, että
MATEMAATTINEN IDENTITEETTI $\neq$
NUMEERINEN IDENTITEETTI

1.14. Numeerisen algoritmin stabiilius. Laskutoimitus tai algoritmi on *epästabiili* l. *häiriöaltis* l. *pahanlaatuinen* (unstable, sensitive,

ill–conditioned), jos pienet virheet lähtötiedoissa vaikuttavat merkittävästi lopputulokseen. Muulloin laskutoimitus tai algoritmi on *stabiili* l. *hyvänlaatuinen* (stable).

Perusesimerkki epästabiilista ongelmasta on yhtälöryhmän $Ax = b$, missä A on $n \times n$ matriisi, ratkaiseminen kun A on "huono". Yksikäsitteinen ratkaisu ei yleensä ole mahdollista jos $\det(A) = 0$, siis tällaiset (singulaariset) matriisit ovat tässä mielessä huonoja. Mutta myös tapauksessa $\det(A) \neq 0$ voi matriisi olla "huono". Neliömatriisin häiriöalttiutta voidaan kvantitatiivisesti mitata ns. *kuntoisuusluvulla*. Kuntoisuusluvun suuruus (≥ 1) on parempi kvantitatiivinen mitta häiriöalttiudelle kuin $|det(A)|$.

1.15. Esimerkki. Suorien

$$\begin{cases} y = x, & \delta = 10^{-p},\ p = 2, 3, \ldots \\ y = (1+\delta)x - 1 \end{cases}$$

leikkauspiste on $(\frac{1}{\delta}, \frac{1}{\delta})$. Siis tehtävä on epästabiili. Suorien

$$\begin{cases} y = x, & \delta = 10^{-p},\ p = 2, 3, \ldots \\ y = -(1+\delta)x + 1 \end{cases}$$

leikkauspiste on $(\frac{1}{2+\delta}, \frac{1}{2+\delta})$. Siis tämä tehtävä on stabiili.

1.16. Kuvaajan piirto ASCII-merkein. Oppikirjamme NR tarjoaa ohjelman `scrsho.cpp` kuvaajan hahmottelemiseksi ASCII-merkein. Ohjelman avulla piirrämme funktion $y = \tan(\sin(x) + \cos(x))$ kuvaajan. Annamme käskyn:

```
g++ -Wall myascplt.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr
```

missä `myascplt.cpp` on seuraava ohjelma:

```
/* FILE: myascplt.cpp begins                                    */
/*   g++ -Wall myascplt.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr  */
/* Plots a function with ASCII characters */
/* Modified from xscrsho.cpp/NR  for NRC02 */

#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
```

```
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"

double fx(const double  x)
{
  return tan(sin(x) + cos(x));
}

int main()
{
  NR::scrsho(fx);
  return 0;
}
/* FILE: myascplt.cpp ends                                    */
```

Ajamalla ajokelpoisen ohjelman `./a` saamme seuraavan kuvan:

```
Enter x1 x2 (x1=x2 to stop):

      6.29 l----------------------------x------------------------------l
           l                            x                              l
           l                           x                               l
           l                              x                            l
           l                          x                                l
           l                                                           l
           l                         x     x                           l
           l                                x                          l
           l                        x        x                         l
           l                      xx          xx                       x
           x------------------xxx--------------xx--------------------xx-
           lxx              xx                    xx              xxx  l
           l  xx          xx                        xx          xx     l
           l    x        x                            x        x       l
           l     x                                     x              l
           l            x                               x     x       l
           l      x    x                                              l
           l                                                 x         l
           l       x                                      x            l
           l          x                                      x         l
      -6.29 l--------xx-----------------------------------xx-----------l
                -4                                                    6

Enter x1 x2 (x1=x2 to stop):
```

1.17. Käyrien ja pintojen piirto gnuplotilla. Edellä esitelty kuvaajan piirtotapa soveltuu tilanteisiin, joissa riittää kuvaajan karkea hah-

mottelu. Menettely on käytettävissä kaikissa käyttöympäristöissä ja päätetyypeissä. Merkittävästi parempia kuvia saadaan julkisohjelmalla gnuplot, jolla voidaan piirtää käyriä ja pintoja. Gnuplot on asennettu mm. Matematiikan laitoksen useisiin mikroihin ja myös Yliopiston ATK-osaston laitteisiin ja se löytyy myös RedHat Linux-asennusrompulta.

Piirto tapahtuu kahdessa vaiheessa. Ensin funktio taulukoidaan kirjoittamalla lukuparit x y riveittäin tiedostoon tmp.dat. Sen jälkeen käynnistetään gnuplot käyttöjärjestelmän komennolla `gnuplot` ja piirretään kuvaaja gnuplotin käskyllä `plot 'tmp.dat'`.

Gnuplotin käytön helpottamiseksi C-kielen sisältä on kurssia varten tehty ohjelma `gnuplt1.c`, joka on saatavissa hakemistossa

`/pub/nrc02/gnuplot02`.

Siellä on myös muita aiheeseen liittyviä ohjelmia. Ohjelman `gnuplt1` avulla voidaan samaan kuvaan piirtää enintään viiden funktion kuvaajat. Pääohjelma `gnuplt1`:n käyttämiseksi voisi olla vaikkapa seuraava:

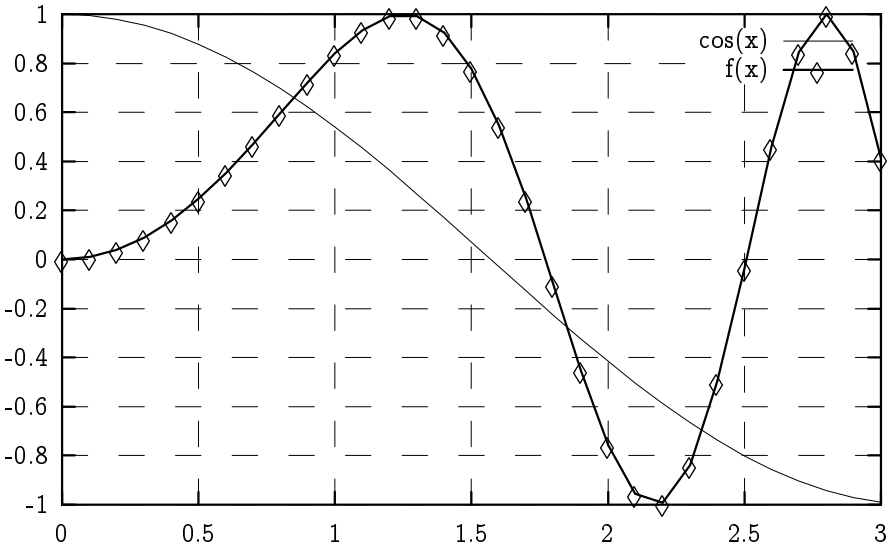
```
/* FILE: myplt.cpp begins                                        */
/* g++ myplt.cpp -I../gnuplot02 -o a -lm */
/* This program uses "gnuplt1.c"  to draw y=cos(x)
and y=sin(x^2) in the same picture. You can input
the x ranges to the aforementioned functions.
It is also shown how the program "plot.c"
can be used for the same purpose.
Observe that gnuplt1 generates the picture gnuplt1.ps
and that  plot generates the picture plot.ps
if PRINT is set equal to 1.
N.B. this is independent of any libraries  */

#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <math.h>
```

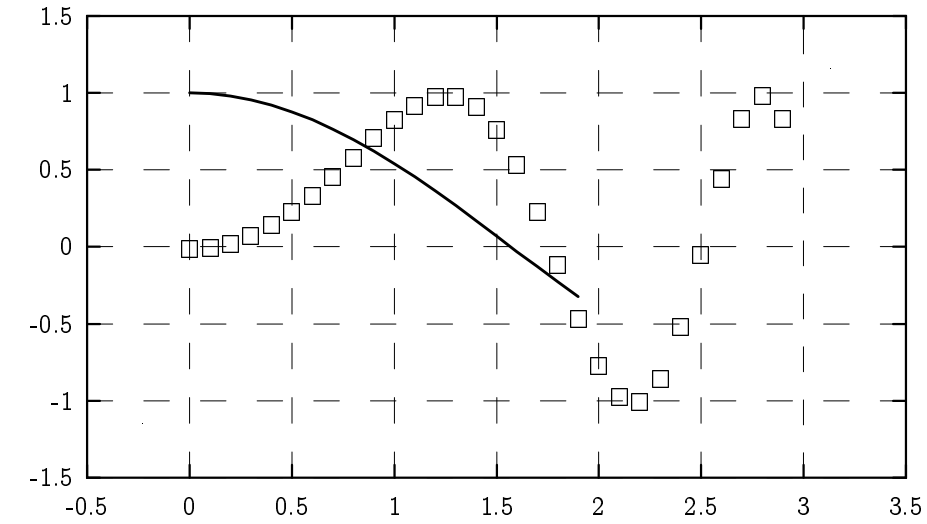
```
#define PRINT 1    /* If = 0 then no .ps files! */
using namespace std;

#include "gnuplt1.h"
#include "plot.h"

double f(double x)
{
  return sin(x * x);
}

void MyPlot0()
{
  const char *fname[5];
  fname[0]="z0.dat";
  fname[1]="z1.dat";
  fname[2]="z2.dat";
  FILE *fp;
  fp=fopen(fname[0],"w");
  if (fp!=NULL)
  for (int i=0;i<20;i++)
    {
      fprintf(fp,"%10.4f %10.4f \n",i*0.1, cos(i*0.1));
     }
  fclose(fp);
  fp=fopen(fname[1],"w");
  if (fp!=NULL)
  for (int i=0;i<30;i++)
    {
      fprintf(fp,"%10.4f %10.4f \n",i*0.1, f(i*0.1));
     }
  fclose(fp);
  plot(fname[0],"b-3", fname[1],"rs2",NULL);
}

int main()
{
  gnuplt1( cos, "cos(x)", 0, f, "f(x)", 2, NULL);
  MyPlot0();
  return 0;
}
/* FILE: myplt.cpp ends                                          */
```

Edellä käytetty ohjelma `gnuplt1.c` taulukoi myös piirrettävät

funktiot ja kirjoittaa lopuksi taulukon tiedostoon. Alla ohjelman tuottama tiedosto typistettynä.

```
FILE:  z.tmp  begins.  31-Dec-2001, 0:58

Output of gnuplt1() tabulation of functions:
f0 = cos(x)
f1 = f(x)

           x1           x2           f1           f2
-----------------------------------------------------
 0.000000e+00 0.000000e+00 1.000000e+00 0.000000e+00
 1.000000e-01 1.000000e-01 9.950042e-01 9.999833e-03
 2.000000e-01 2.000000e-01 9.800666e-01 3.998933e-02
(.... )
 2.900000e+00 2.900000e+00 -9.709582e-01 8.493634e-01
 3.000000e+00 3.000000e+00 -9.899925e-01 4.121185e-01

Minimum of each function:
 3.000000e+00 2.200000e+00 -9.899925e-01 -9.918688e-01
Maximum of each function:
 0.000000e+00 2.800000e+00 1.000000e+00 9.999023e-01
```





Joissakin tapauksissa `gnuplt1` voi antaa hieman kulmikkaan kuvaajan säännölliselle funktiolle. Näin voi käydä esimerkiksi silloin, kun datapisteitä on käytettävissä vain vähän. Kulmikkuuden korjaamiseksi voidaan muokata `gnuplt1`:n generoimaa tiedostoa `gnuplt1.cmd` sopivasti. Tiedoston sisältö voi olla esim. seuraava

```
   set grid

plot "z1.tmp"title 'sin(x)' with lines lw 1,"z2.tmp"title 'f(x)' with linespoints
lw 1
pause -1
set terminal postscript
set output "gnuplt1.ps"
replot
```

Korjataan tiedosto seuraavasti

```
   set grid

plot "z1.tmp"title 'sin(x)' with lines lw 1, "z2.tmp"smooth csplines with
lines lw 2, "z2.tmp"with points pt 3 ps 3
pause -1
```

Käynnistetään `gnuplot` Linux promptista käskyllä
`gnuplot gnuplt1.cmd`.
Silloin saadaan sileämpi kuvaaja.

Seuraava esimerkki käyttää jo varsin monipuolisesti NR-kirjastoa ja piirtää kuvan *Gaussin hypergeometrisesta funktiosta.* Kompleksiluvuille $|z| < 1$ funktio määritellään sarjalla

$$ {}_2F_1(a,b;c;z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a,n)(b,n)}{(c,n)n!} z^n, $$

missä $(a,n) = a \cdots (a+n-1), (a,0) = 1$. Monet funktiot ovat sen erikoistapauksia, mm. ${}_2F_1(a,b;b;z) = (1-z)^{-a}$ (tapauksessa $a = 1$ saadaan geom. sarja) ja ${}_2F_1(1,1;2;z) = -(1/z)\log(1-z)$. Allaolevan ohjelman avulla lasketaan funktion

$$ g(z) = {}_2F_1(a,b;c;z) - (1-z)^{-a}\,{}_2F_1(a,c-b;c;\frac{z}{z-1}) $$

arvoja kun $(a,b,c) = (\frac{1}{2},\frac{1}{2},1)$ ja voidaan todeta arvot nolliksi (näin pitääkin olla), kun z on reaalinen välillä $(0,1)$ (seuraavan ohjelman `mysurf` avulla voitaisiin piirtää funktion $g(x,y)$ pinta.)

```
/* FILE: myhypgeo.cpp begins.                                    */
/*  g++ myhypgeo.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr      */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2

#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#define PLOT 1

using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"

#include "plot.h"

int MyPlot(Vec_DP x0,Vec_DP y0)
{
  int n=x0.size();
  const char *fname[10];
```

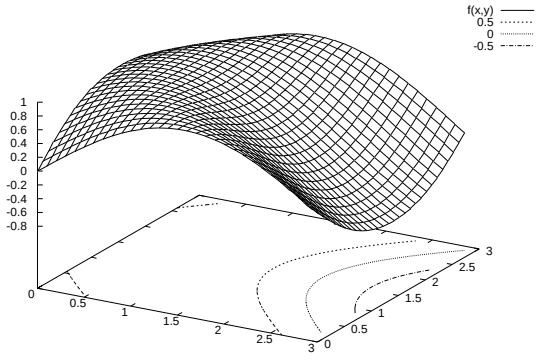
```
  fname[0]="z0.dat";
  for (int j=0;j<1;j++)
  {
    ofstream fp(fname[j]);
    if (fp.fail())
    {
      cout << "File  "<< fname[j]
           <<" could not be opened.\n"<<endl;
      abort();
    }
    if (j==0)
      for (int i=0;i<n;i++)
        fp<<x0[i]<<"  "<<y0[i]<<endl;
    fp.close();
  }
  plot(fname[0],"b-2",NULL);
  return 0;
}


DP Tst_2F1_idty(complex <double> a,complex <double> b,
                complex <double> c,complex <double> z)
{
    complex<DP> z1=-z/(1.0-z),q1,q2;
    q1=NR::hypgeo(a,c-b,c,z1);
    q2=pow(1.0-z,a)*NR::hypgeo(a,b,c,z);
    return( abs(q1-q2));
}
int main(void)
{
  DP x,y;
  Vec_DP xx(31), yy(31);
  complex<DP> a(0.5,0.0),b(0.5,0.0),c(1.0,0.0);
  complex<DP> z,q1;
  cout << fixed << setprecision(6);
  for (;;) {
    cout <<
    "Input X Y of Complex Argument (or 0 0 to end):" << endl;
    cin >> x >> y;
    cout << endl;
    if ((x == 0.0) && (y == 0.0)) break;
    z=complex<DP> (x,y);
    DP t=Tst_2F1_idty(a,b,c,z);
    cout << "Difference =\n"<<endl;
    cout << setw(11) << t << endl;
```

```
  }
  for (int i=0;i<=30;i++)
  {
    xx[i]=i*0.03;
    z=complex<DP> (xx[i],0);
    q1=NR::hypgeo(a,b,c,z);
    yy[i]=real(q1); //Tst_2F1_idty(a,b,c,z);
  }
  MyPlot(xx,yy);
  return 0;
}
/* FILE: myhypgeo.cpp ends.                                    */

Input X Y of Complex Argument (or 0 0 to end):
0.4
0

Difference =

8.88178e-16
Input X Y of Complex Argument (or 0 0 to end):
0
0
```

Edellä esitelty gnuplotin käyttötapa, joka toimii kaikilla sovellusalustoilla, on tälle kurssille täysin riittävä. www-sivun esimerkkiohjelmien mukana on myös em. ohjelman `myplt.cpp`. kehittyneempi versio `mypltavd.cpp` joka käyttää C++:n erityispiirteitä. Linux-ympäristössä on mahdollista putkien avulla tapahtuva käyttö suoraan C-ohjelman sisältä, mutta tätä emme jatkossa käytä. Seuraava esimerkki valaisee ohjelman `gnusurf.c` käyttöä pinnan piirtämiseksi.

```
/* FILE: mysurf.cpp begin                                      */
/*g++ mysurf.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr */
/*
This program uses "gnusurf" to draw the function z=x+sin(y)
and to calculate its minimum and maximum values. The user
enters the x and y ranges to the aforementioned function.
```

```
*/

#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include  <ctime>
#include <cmath>

#define PRINT 1
#define SCALE 1     // Positive constant "scales" the z-axis

#include "gnusurf.h"

double f(double x, double y)
{
  return sin(x + sin(y));
}

int main()
{
  double xx[] = { -5.0, 5.0 }, yy[] = { -5.0, 5.0};
  gnusurf(f, xx, yy, SCALE, 0, "f(x,y)", "f(x,y)");
  return 0;
}
/* FILE: mysurf.cpp end                                          */
```



Ohjelma tekee tiedoston `gnusurf.tmp`, johon kirjoitetaan myos funktion suurin ja pienin arvo lasketussa pisteistössä.

```
FILE:  gnusurf.tmp  begins.  31-Dec-2001, 1:19

f = f(x,y)
```

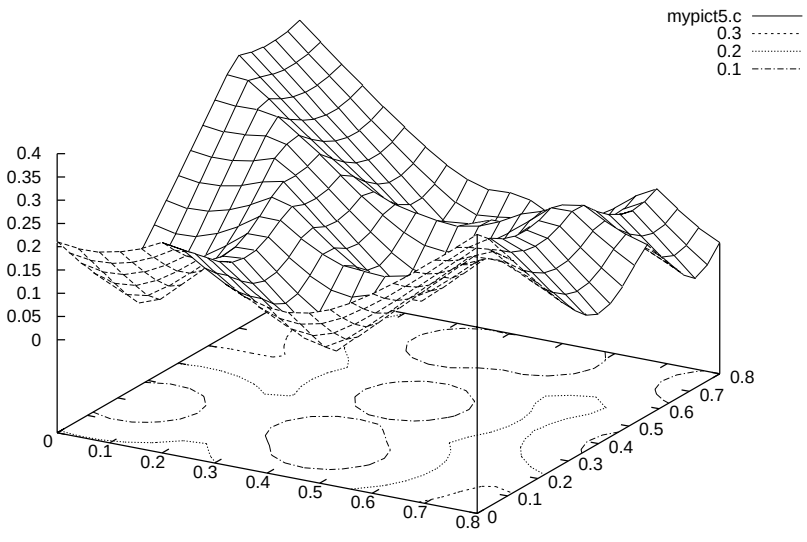
```
In the region -2.3 < x < 2.7, -3.4 < y < 3.4
Minimal function value -0.999999
Attained at x = -1.1 , y = -2.65

Maximal function value 0.999983
Attained at x = 1.9 , y = -2.8



f = f(x,y)

In the region -2.3 < x < 3.4, -3.4 < y < 3.4
Minimal function value -9.99998e-01
Attained at x =   -2.00000 , y =    2.70000

Maximal function value 9.99998e-01
Attained at x =    2.00000 , y =   -2.70000
```

Seuravaaksi piirrämme kuvan pinnasta, jolla on m kpl minimejä.

```
/* FILE: mysurf2.cpp begin                                    */
/*g++ mysurf2.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr */
/*
For a random integer m in [5,MAX_NR-1] we choose m random
points (x[i],y[i]) in (0,1)x(0,1) and define f2(a,b) to
be equal to the logarithm of the distance from (a,b) to the
set of these m random points. The surface f2 is graphed.
It should have m minima!
*/

#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include <ctime>
#include <cmath>
#include <climits>


//#define PRINT 0
#define SCALE 1
#define MAX_NR 10
```

```
#include "gnusurf.h"

float x[MAX_NR], y[MAX_NR];     /* Global variables */

double f(double x, double y)
{
  return sin(x + sin(y));
}

double f2(double a, double b)
{
  double mi =
    pow(pow(a - x[0], 2) + pow(b - y[0], 2), 0.5), s = 0.0;
  for (int i = 1; i < MAX_NR; i++)
  {
    s = pow(pow(a - x[i], 2) + pow(b - y[i], 2), 0.5);
    if (s < mi)
      mi = s;
  }
  return log(1e-20+mi); /*  log(0) is not defined ! */
}

int main()
{
  double xx[] = { -5.0, 5.0 }, yy[] =
  {  -5.0, 5.0};
  unsigned seed = time(NULL);
  /* This generates a seed for the random number
     generator using system clock. */
  int  m, mi = 6, ma = MAX_NR - 1;
  srand(seed);
/* This initiates the random number
   generator with the given seed. */
  m = (int) (mi + (rand() * 1.0 / INT_MAX) * (ma - mi));
  /* m is rdm integer in (mi,ma) */
  for (int i = 0; i <= MAX_NR - 1; i++)
  {
    x[i] = (float) ((rand() * 1.0 / INT_MAX));
    y[i] = (float) ((rand() * 1.0 / INT_MAX));
    if (i > m - 1)
    {
      x[i] = x[0];
      y[i] = x[0];
    }
  }
```

```
  /* (x[i],y[i]) are random points in (0,1) */
  gnusurf(f2, xx, yy, SCALE, 0, "f2(x,y)", "f2(x,y)");
  return 0;
}
/* FILE: mysurf2.cpp end                                    */
```



Ohjelma tekee tiedoston gnusurf.tmp, johon kirjoitetaan funktion suurin ja pienin arvo.

```
FILE:  gnusurf.tmp  begins.  4-Jan-2002, 21:47

f = f(x,y)

In the region    0.00000 < x <    1.00000,    0.00000 < y <    1.00000
Minimal function value 0.00000e+00
Attained at x =    0.00000 , y =    0.00000

Maximal function value 9.99994e-01
Attained at x =    0.85000 , y =    0.80000
```

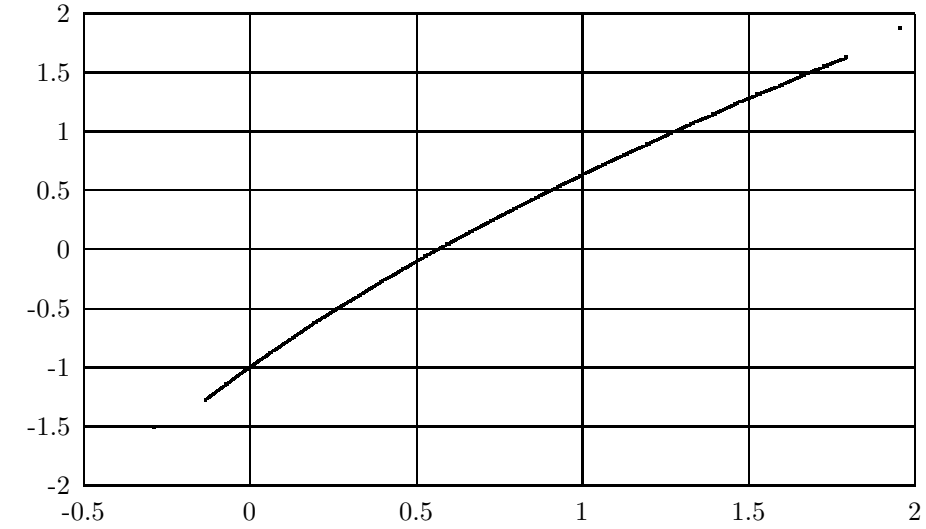
1.18. Välinpuolitusmenetelmä. Olkoon $f : [a, b] \to R$ jatkuva funktio, jolla $f(a)$ ja $f(b)$ ovat erimerkkiset. Silloin f:llä on ko. välillä

ainakin yksi nollakohta. Oletamme nyt lisäksi, että funktiolla on täsmälleen yksi nollakohta x_0. Silloin likiarvo x_0:lle voidaan löytää seuraavaavan koulukurssista tunnetun *välinpuolitusmenetelmän* avulla. Olkoon $c = (a+b)/2$. Jos $f(a)f(c) < 0$, asetetaan b:lle arvoksi c. Jos $f(b)f(c) < 0$, asetetaan a:lle arvoksi c. Jos $|a-b|$ tai $|f(c)|$ on kyllin pieni, on löydetty riittävän hyvä likiarvo nollakohdalle. Muussa tapauksessa toistetaan iteraatiota uusilla a:n ja b:n arvoilla. On selvää, että samalla menetelmällä voidaan etsiä myös yhtälön $f(x) = y$ juuri annetulla y, ts. löytää käänteisfunktion arvo. Yksityiskohdat ilmenevät allaolevasta koodista, jossa juurenhaun lisäksi samalla algoritmilla etsitään todennäköisyyslaskennasta tutun normaalijakauman kertymäfunktion $\Phi(x)$ käänteisfunktio.

```
/* FILE: mybisect.cpp begins                                */
/* g++ mybisect.cpp -I../utils  -L../lib -o a -lm -lnr */
/* This program computes the inverse function of a given
   function f, i.e. for a fixed y, solves f(x)=y for x.
   This algorithm is based on bisection (see D. Yang: C++ and
    object oriented numeric computing, Springer2001, p.164).
*/
#include <cmath>
#include <iostream>
#include <cstdio>
#include <cstdlib>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "plot.h"
double invf(double a, double b, double y, double (*f)(double),
                 double delta, double epsn, int maxit)
/*
invf returns a value x on the interval (a,b) such that f(x)=y.
Based on bisection of the interval (a,b) such that x remains
inside. Stopping criterion: iteration stopped when one of
the following is satisfied:
           (1)interval length <delta
           (2)number of iterations >maxit
           (3)residual tolerance < epsn
NB. c=a+e, e=(b-a)/2 and (a+b)/2 are mathematically
    equivalent but the former is preferable because of its
    numerical properties.
```

```
*/
{
  double u = f(a)-y;                // fcn value at left pt
  double e = b - a;                 // interval length
  double c = b;
  for (int k = 1; k <= maxit; k++)  // main iteration loop
  {
    e *= 0.5;                       // shrink interval by half
    c = a + e;                      // update middle pt
    double w = f(c)-y;              // fcn value at middle pt
    if
     ((fabs(e) < delta) ||( fabs(w) < epsn)|| (k==maxit)) return c;
    ((u > 0 && w < 0) || (u < 0 && w > 0)) ? (b = c) :
              (a = c, u = w);
  }
  return c;
}


double fb(double x)
{return (x - exp(-x)); }

double fc(double x)
{return (exp(x)); }

double Phi(double x) /* Phi(t) = P({x <t}) with
                        x in N(0,1) */
{  return 0.5*(1+erff(x/pow(2.0, 0.5)));}

void Tabulate()
{
  double del=1e-15, eps=1e-15;
  for (int i=1;i<=20;i++)
    {
      double x=i*0.05;
      double y=fc(x);
      double t=invf(-1.0,2.0,y,fc,del,eps, 60);
      printf("%10.6f  %10.6f  %10.6f  %12.4e  \n",x,y,t,t-x);
    }
  cout<<"   p       InvPhi(p)      Error:"<<endl;
  for (int i=1;i<20;i++)
    {
      double y; //=Phi(x);
      (i>10)?(y=0.9+(i-10)*0.01):y=0.5+(i-1)*0.05;
      double t=invf(-1.0,8.0,y,Phi,del,eps, 200);
```

```
      printf("%10.6f  %10.6f  %12.4e   \n",y,t, Phi(t)-y);
    }
  cout<<" InvPhi(0.99995)= "
      <<invf(0, 8, 0.99995,Phi,del,eps,200)<<endl;
}

int MyPlot(Vec_DP x,Vec_DP y)
{
  int n=x.size();
  const char *fname="a.dat";
  ofstream fp(fname);
  if (fp.fail())
    {cout << "File  "<< fname <<" could not be opened.\n"<<endl;
      abort();}
  for (int i=0;i<n;i++)  fp<<x[i]<<"  "<<y[i]<<endl;
  fp.close();
  plot(fname,"b-4",NULL);
  return 0;
}
int main() {
  double epsn=1e-5, delta=epsn, root, y=0.0;
  root = invf(1e-2, 2.0,y, fb, delta, epsn, 20);
  cout << "Approximate root of fb()-y=0 by invf() is: "
       << root << '\n';
  cout << "Fcn value at approximate root (residual) is:"
       << fb(root)-y << '\n';

  Vec_DP x(30),yval(30);
  for (int i=0;i<30;i++)
  {
    x[i]=root-1+(2.0/30)*i;
    yval[i]= fb(x[i]);
  }
  MyPlot(x,yval);
  Tabulate();
}
/* FILE: mybisect.cpp ends                                    */
```




```
Approximate root of fb()-y=0 by invf() is: 0.567144
Fcn value at approximate root (residual) is:1.78914e-06


  0.050000    1.051271    0.050000    2.6368e-16
  0.100000    1.105171    0.100000    8.3267e-17
(....)
  0.950000    2.585710    0.950000   -3.3307e-16
  1.000000    2.718282    1.000000   -4.4409e-16
   p        InvPhi(p)      Error:
  0.500000    0.000000    1.7716e-16
  0.550000    0.125661    3.4499e-09
(....)
  0.970000    1.880794    3.4438e-09
  0.980000    2.053749   -2.8952e-09
  0.990000    2.326348    7.6522e-10
 InvPhi(0.99995)= 3.89059
```

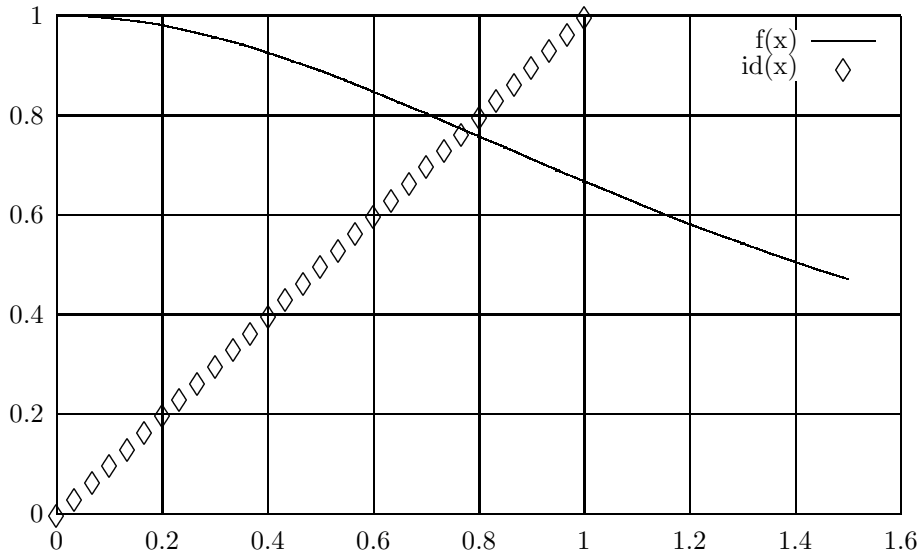
1.19. Kiintopisteiteraatio. Toinen erittäin yksinkertainen menetelmä juuren etsimiseksi on kiintopisteiteraatio. Olkoon $f : R \to R$ jatkuva funktio ja $x_0 \in R$. Määritellään $x_{n+1} = f(x_n), n = 0, 1, \ldots$. Millä ehdolla jono (x_n) suppenee? Ns. Banachin kiintopistelauseen nojalla eräs riittävä ehto on, että on olemassa vakio $L \in (0, 1)$ siten,

että kaikki pisteet sijaitsevat välillä $[a,b]$ ja $|f(x)-f(y)| \leq L|x-y|$ kaikilla $x, y \in [a,b]$. Jonon rajapiste $\overline{x}$ toteuttaa yhtälön $f(\overline{x}) = \overline{x}$.

Seuraava algoritmi käyttää tätä ideaa. Joskus on syytä konvergenssin takaamiseksi soveltaa algoritmia muokattuun funktioon, jolla on sama juuri.

```
/* FILE: myfxit.cpp begins                                    */
/*  g++ myfxit.cpp  -o a -lm                                  */
/*  Fixed point iteration x_{n+1}=f(x_n) to solve  f(x)=x. */

#include <stdlib.h>
#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>

#include "gnuplt1.h"

double f(double x)
{
  return pow(1+0.5*pow(x,2.0),-1.0);
}

double idty(double x)
{
  return x;
}

int main()
{
  double x, y, e, tol = 5.0e-10;
  int count = 0;
  printf("Enter the starting approximation:");
  scanf("%lf", &x);
  printf("\n");

  do
  {
```

```
    y = f(x);
    e = fabs(x - y);
    printf("%10.5lf %10.5lf   %10.4e\n",x,y,e);
    x = y;
    count++;
    if (count > 60)
    {
      printf("Maximum number of iterates exceeded.\n");
      exit(1);
    }
  }
  while (e > fabs(y) * tol);

  printf("root= %lf\n", y);
  printf("iterates required = %d\n", count);
  gnuplt1(f,"f(x)",4,idty,"id(x)",23, NULL);
  return 0;
}
/* FILE: myfxit.cpp ends                                        */


Enter the starting approximation: 2
Enter the starting approximation:2

   2.00000    0.33333   1.6667e+00
   0.33333    0.94737   6.1404e-01
(..........)
   0.77092    0.77092   8.5546e-10
   0.77092    0.77092   3.9194e-10
   0.77092    0.77092   1.7958e-10
root= 0.770917
iterates required = 30
```



1.20. Numeerinen integrointi. Jatkuvan funktion $f : [a,b] \to R$ integraalia $\int_a^b f(x)dx$ voidaan approksimoida useilla eri tavoilla. Yksinkertaisinta lienee käyttää Riemannin summia $R_n(f) = \sum_{j=0}^{n-1} f(x_j)h$ jakopisteinä $x_j = a+j*h, j = 0,...,n-1$ missä $h = (b-a)/n$. Lähes yhtä yksinkertainen menetelmä on puolisuunnikaskaava (eli trapetsikaava) $T_n(f) = \sum_{j=0}^{n-1}(f(x_j) + f(x_{j+1}))h/2$. Riemannin summia muodostettaessa funktiota approksimoidaan välillä $[x_j, x_{j+1}]$ vakioarvolla $f(x_j)$, trapetsikaavassa keskiarvolla $(f(x_j)+f(x_{j+1}))/2$. Parempia approksimointeja etsittäessä voidaan käyttää kaavaa $w_1 f(x_j)+ w_2 f(x_{j+1}) + w_3 f(x_{j+2})$ välillä $[x_j, x_{j+2}]$, missä kertoimet w_1, w_2, w_3 valitaan määräämättömien kertoimien menetelmällä:

$$\int_0^{2h} 1dx = 2h = (w_1 + w_2 + w_3) * 2h$$

$$\int_0^{2h} xdx = 2h^2 = (w_1 * 0 + w_2 * h + w_3 * 2 * h) * 2h$$

$$\int_0^{2h} x^2dx = 8h^3/3 = (w_1 * 0 + w_2 * h^2 + w_3 * (2 * h)^2) * 2h$$

josta $w_1 = \frac{1}{6}, w_2 = \frac{2}{3}, w_3 = \frac{1}{6}$. Tähän perustuu Simpsonin kaava, jota alla verrataan kokeellisesti trapetsikaavaan.

```
/* FILE: mynumint.cpp begins.                                    */
/*  g++ mynumint.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr           */
/*  Compares numerical integration by Simpson's method and       */
/*  the trapezoid formula.                                       */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"

double c[5];  /* Global variable */

double f(double x)
{  return c[0]*sin(c[1]*x)+ c[2]*2.0*x; }

double prim_of_f(double x)
/* \int_a^b f(x) dx =  prim_of_f(b)- prim_of_f(a) */
{  return -(c[0]/c[1])*cos(c[1]*x)+c[2]*x*x; }

double trapez(int m, double a, double b,
                              double (*func_ptr) (double ))
/* Trapezoidal formula for numerical integration */
{
  double h=(b-a)/m;
  double s=(*func_ptr)(a)+(*func_ptr)(b);
  s=-0.5*s;
  for (int i=0;i<=m;i++){
    s +=func_ptr(a+i*h);
  }
  s *= h;
  return s;
}

double Simpson(int m, double a, double b,
           double (*func_ptr) ( double))
/* Simpson's formula for numerical integration */
/* m = number of subdivisions
   (a,b) interval of integration               */
{
```

```
  double h=(b-a)/m;
  double s=(*func_ptr)(a)+(*func_ptr)(b);

  for (int i=1;i<=m-1;i++){
    s += (4.0*(*func_ptr)(a+(i-.5)*h)+
                      2.0*(*func_ptr)(a+i*h));
  }
  s += (4.0*(*func_ptr)(a+(m-.5)*h));
  s *= (h/6.0);
  return s;
}

void DoTst(int num_subdiv, double a,double b)
{
  int m=num_subdiv;
  double  s1,s2,err1,err2;
  /* function prototype */
  double Simpson(int m, double a, double b,
                        double (*func_ptr) (double ));
  /* definition and initialization */
  double (*func_ptr)(double)=f;
  s1=Simpson(m, a, b, func_ptr);
  s2=trapez(m, a, b, func_ptr);
  err1= s1-(prim_of_f(b) -prim_of_f(a) );
  err2= s2-(prim_of_f(b) -prim_of_f(a) );
  printf("% 15.10lf  % 8.4e  % 15.10lf  % 8.4e\n",
              s1,err1,s2,err2);
}

int main()
{
  init_srand();
  int num_subdiv=500;
  double a=0, b=1;
  printf("   Simpson          Error         Trapez    Error\n");
  for (int i=1;i<=5;i++)
    {
     for (int j=0;j<5;j++) c[j]=rdm(0.5, 2.5);
     a= rdm(-2, 2.5); b=a+rdm(0.5, 2.5);
     DoTst(num_subdiv,a,b);
    }
}
/* FILE: mynumint.cpp ends.                                    */
```

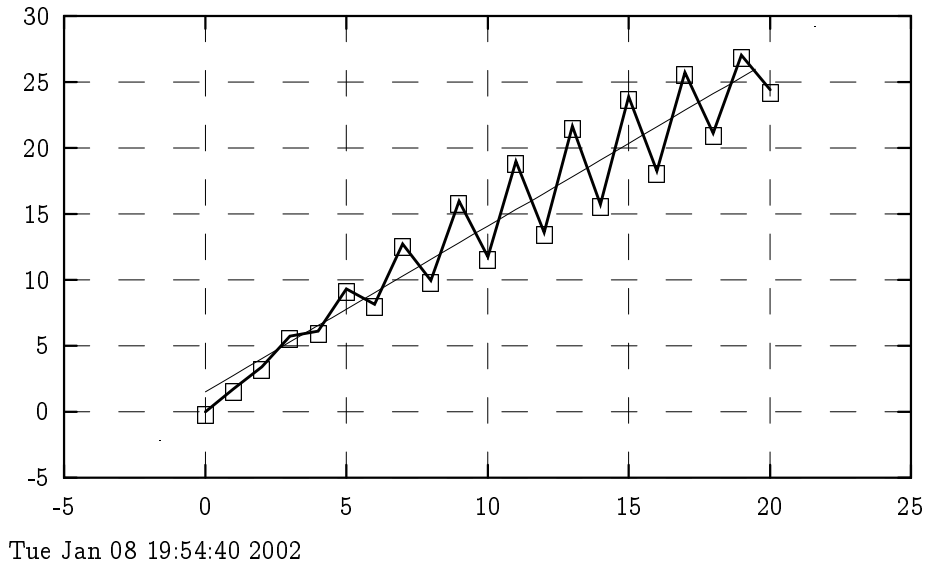
```
   Simpson          Error         Trapez    Error
  -5.7622377489  -3.9968e-15    -5.7622376068   1.4209e-07
  24.8493022581  -7.0344e-13    24.8493086674   6.4094e-06
  -2.3825109332  -8.8352e-13    -2.3825069902   3.9430e-06
  15.9783696594  -5.3557e-13    15.9783725920   2.9326e-06
  25.9879374125   3.5527e-15    25.9879363855  -1.0270e-06
```

1.21. Suoran sovitus dataan. Eräs perustehtävä tilastollisessa data-analyysissa on sovittaa suora datapisteisiin $(x_j, y_j), j = 1, ..., m$, $x_j < x_{j+1}$. Seuraava ohjelma tekee sovituksen ja piirtää datan ja sovitetun suoran kuvaajat.

```
/* FILE: mylsq.cpp begins.                                              */
/* g++ -Wall mylsq.cpp -L../lib -I../gnuplot02 -I../utils -o a -lm -lnr */

#include <stdlib.h>
#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
/*
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
*/
#define PRINT 1

using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#include "plot.h"

int MyPlot(Vec_DP x0,Vec_DP y0, Vec_DP x1,Vec_DP y1,
           Vec_DP x2,Vec_DP y2)
  /*
Plots three curves x0,y0, x1,y1,  x2, y2.
Here x0, y0 have equal length likewise for x1,y1 and x2,y2.
But the lengths of x0 and x1 need not be the same.
*/
{
  int n0=x0.size(), n1=x1.size(),n2=x2.size();
  const char *fname[10];
  fname[0]="z0.dat";
```

```
  fname[1]="z1.dat";
  fname[2]="z2.dat";
  for (int j=0;j<3;j++)
  {
    ofstream fp(fname[j]);
    if (fp.fail())
      {cout << "File  "<< fname[j]
            <<" could not be opened.\n"<<endl;
      abort();}
    if (j==0)  for (int i=0;i<n0;i++)
      fp<<x0[i]<<"  "<<y0[i]<<endl;
    if (j==1)  for (int i=0;i<n1;i++)
      fp<<x1[i]<<"  "<<y1[i]<<endl;
    if (j==2)  for (int i=0;i<n2;i++)
      fp<<x2[i]<<"  "<<y2[i]<<endl;
    fp.close();
  }
  plot(fname[0],"b-3",fname[1],"r-4",fname[2],"ks3",NULL);
  return 0;
}


void LSQcoef(Vec_DP &x, Vec_DP & y, DP &a, DP &b  )
  /* For given data x, y fits a line a*t + b */
{
  double s1=0.0,s2=0.0,s3=0.0,s4=0.0, s5=0.0, xave;
  int  m=x.size();
  for (int i =0;i<m;i++)
  {
    s1+=x[i];
    s2+=y[i];
    s3+=x[i]*y[i];
    s4+=x[i]*x[i];
  }
  s5=0.0; xave=(1.0*s1)/m;
  for (int i =0;i<m;i++)
    { s5+=pow(abs(x[i]- xave), 2.0);}
  /* The above method for computing s5 is numerically
     better than the formula s5=s4-(1.0/m)*s1*s1;.
     Mathematically both are the same.
  */
  if (s5<1e-20)
    {cout<<"Data with zero variance in LSQcoef"<<endl;
     s5=1e-20;
    }
```

```
  a=1.0*(s3-(1.0/m)*s1*s2)/(1.0*s5);
  /*
    If you replace above (1.0/m) by (1/m)
    you will not get the correct result!
  */
  b=(s2-a*s1)/m;
}
int main()
{
  int m=21;
  Vec_DP x(m), y(m), xi(40), yi(40);
  double a,b;
  for (int i=0;i<m;i++)
    {x[i]= i*1.0;
    y[i]= x[i]+ log(1.0+x[i]*x[i]);
    y[i]= y[i]*(1.0+ 0.2*sin(3*x[i]));
    }
  LSQcoef(x,  y, a, b  );
  for (int i=0;i<40;i++)
    {
      xi[i]=i*0.5;
      yi[i]=a*xi[i] + b;
    }
  cout<<"a= "<<a<<", b= "<<b<<endl;
  MyPlot(x,y,xi,yi,x,y);
 }
/* FILE: mylsq.cpp ends.                                    */


OUTPUT:
a= 1.25512, b= 1.51009
```



1.22. Monte Carlo-integrointi. Monte Carlo-integrointi on nimetty Monacossa sijaitsevan kasinon mukaan. Lähtökohtana on suorakulmiossa

$$B = [a_1, b_1] \times [a_2, b_2] \times ... \times [a_m, b_m]$$

sijaitseva kappale K, jonka tilavuus $v(K)$ halutaan määrittää. Kappaleen määrittelee sen karakteristinen funktio $\chi_K(x)$, joka saa arvon 1 kun $x \in K$ ja 0 muulloin. Muodostamme tasaisen jakauman mukaan n pistettä suorakulmiosta B ja olkoon p niiden pisteiden lukumäärä, joissa $\chi_K(x)$, saa arvon 1. Silloin

$$v(K) \approx \frac{p}{n} v(B).$$

Seuraavalla ohjelmalla laskemme yksikkökuulan tilavuudelle likiarvoja ja vertaamme tulosta tarkkaan arvoon.

```
/* FILE: mymoncar.cpp begins.                                  */
/*  g++ mymoncar.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr    */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
```

```
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.cpp"

long tstRes(int Ndim, long howMany)
{
   int i=0,count=0;
   double tmp,tmp2;
   Vec_DP x(Ndim);
   while (i <=howMany)
   {
      for (int k=0;k<Ndim;k++)
      {
         x[k]=(float)rdm(0.0, 1.0);
      }
      if (vnormp(x,2.0)<1.0) count++;
      // vnormp is part of matutl02.cpp
      i++;
   }
   return count;
}

int BallVolume(void)
{
   long k, i=0,count =0,np ,nrt;
   double tmp,tmp2;
   init_srand();
   printf(
"\n  n   2000   4000     6000    8000   10000  Expected\n");
   for (np=2;np<=8;np++)
   {
      printf(" %2ld",np);
      for (nrt=2; nrt<=10;nrt+=2)
      {
         count=tstRes(np,nrt*1000);
         printf("%8.4f",count*0.001/nrt);
      }
      tmp=pow(M_PI,0.5*np)/exp(NR::gammln(1.0+0.5*np));
      printf("%8.4f \n", tmp*pow(2.0,-(double)np));
   }
   return 0;
}
```

```
int main()
{
  BallVolume();
}
/* FILE: mymoncar.cpp ends.                                        */

/*

  n    2000    4000     6000     8000    10000  Expected
  2  0.7930  0.7790  0.7893  0.7925  0.7811  0.7854
  3  0.5250  0.5185  0.5285  0.5214  0.5246  0.5236
  4  0.3045  0.3038  0.3088  0.3040  0.3049  0.3084
  5  0.1750  0.1598  0.1630  0.1540  0.1624  0.1645
  6  0.0840  0.0850  0.0903  0.0780  0.0821  0.0807
  7  0.0300  0.0338  0.0378  0.0385  0.0395  0.0369
  8  0.0135  0.0158  0.0175  0.0124  0.0146  0.0159

*/
```

1.23. Eulerin menetelmän epästabiilisuus. Alkuarvotehtävän $y' = -100y + 100, y(0) = y_0$ ratkaisu on $y(t) = (y_0 - 1)exp(-100 * t) + 1$. Eulerin menetelmää kiinteällä askelpituudella h voidaan käyttää sen ratkaisun numeeriseen approksimointiin:

$$x_0 = 0; \qquad y_0 = y0; \qquad x_{k+1} = x_k + h;$$

$$y_{k+1} = y_k + h * (100 - 100 * y_k) = (1 - 100 * h) * y_k + 100 * h.$$

Jos $y_0 = 2$ niin ratkaisu on $y(t) = 1 + exp(-100 * t)$.

Induktiolla nähdään, että em. Eulerin rekursio johtaa kaavaan: $y_k = (y_0 - 1)(1 - 100 * h)^k + 1$. Siinä tapauksessa, että $|1 - 100h|$ on kyllin pieni Eulerin menetelmä näyttää toimivan hyvin, kun taas arvoilla $h > 0.02$ divergoivan. Tämä ilmenee myös ohjelman tulostuksesta.

```
/* FILE: myeuler.cpp   begins          */
/*  g++ -Wall myeuler.cpp  -o a        */
/* This program demontrates the instability
   of Euler's method */
```

```
#include <cstdio>

double myf(double x, double y)
{
  return (1.0-y)*100.0;
}

int main(void)
{
  double h=0.005, x=0.0,y;
  printf("Instability of Euler's method\n");
  for (int j=1;j<=12;j++)
    {
      x=0.0;y=2.0;
      h=h+0.005;
      printf("---------\nh= %6.3lf\n---------\n"
             " %6s   %12s\n",h,"x","y");
      while (x<=1.0)
        {
          x=x+h;
          y=y+h*myf(x,y);
          printf("%8.4lf %15.4lf \n",x,y);
        }
    }
  return 0;
}
/* FILE: myeuler.c ends                                          */

TULOSTUSTA:

Instability of Euler's method
---------
h=  0.010
---------
      x              y
  0.0100          1.0000
  0.0200          1.0000
  0.0300          1.0000
  0.0400          1.0000
(....)
  0.9800          1.0000
  0.9900          1.0000
  1.0000          1.0000
---------
h=  0.015
```

```
---------
      x             y
  0.0150          0.5000
  0.0300          1.2500
  0.0450          0.8750
  0.0600          1.0625
  0.0750          0.9688

(....)
  0.9450          1.0000
  0.9600          1.0000
  0.9750          1.0000
  0.9900          1.0000
  1.0050          1.0000
---------
h=  0.020
---------
      x             y
  0.0200         -0.0000
  0.0400          2.0000
  0.0600         -0.0000
  0.0800          2.0000
  0.1000         -0.0000
(....)

  0.9200          2.0000
  0.9400         -0.0000
  0.9600          2.0000
  0.9800         -0.0000
  1.0000          2.0000
---------
h=  0.025
---------
      x             y
  0.0250         -0.5000
  0.0500          3.2500
  0.0750         -2.3750
  0.1000          6.0625
  0.1250         -6.5938
 (....)
  0.8750   -1456108.6060
  0.9000    2184165.4091
  0.9250   -3276245.6136
  0.9500    4914370.9204
  0.9750   -7371553.8806
```

```
  1.0000   11057333.3209
---------
h=  0.030
---------
      x              y
  0.0300         -1.0000
  0.0600          5.0000
  0.0900         -7.0000
  0.1200         17.0000
  0.1500        -31.0000
(....)
  0.9300 -2147483647.0000
  0.9600 4294967297.0000
  0.9900 -8589934591.0000
  1.0200 17179869185.0001
```

VEKTORIT JA MATRIISIT

1.24. NRC-ohjelmien käyttöohjeet. Kutakin NR:n aliohjelmaa kohti on pääohjelma, joka demoaa aliohjelman käyttöä. Nämä pääohjelmat tekijät ovat koonneet kirjaksi NR Example Book, jonka kopio on 5. krs:n kurssimapissa. Samassa mapissa on myös kurssia varten tehtyjä erilaisia ohjeita mm. kirjaston laatimisesta, jotka löytyvät myös kurssin kotisivulta.

1.25. Vektori ja matriisi tietorakenteina NR:n mukaan. Vektori ja matriisi on määritelty C++:n luokiksi, joiden metodeina ovat monet numeerisen lineaarialgebran perusoperaatiot. Luokkien ilmentymät määritellään seuraavaan tyyliin.

```
Mat_DP a(5,3);
Vec_DP x(3);
for (int i=0;i<x.size();i++) x[i]= i*3.2;
for (int i=0;i<a.nrows();i++)
for (int j=0;j<a.ncols();j++) a[i][j]= 1.0/(i+j+1);
cout <<"a= "<<a<<endl;
Vec_DP z(5);
matvecmul(a,x,z);
cout<<"z="<<z<<endl;
```

Seuraavassa on luonnosteltu matriisien manipulointiin soveltuvia toimintoja sekä annettu esimerkki näiden toimintojen käytöstä pääohjelmassa `myutl4.cpp`.

Huomaa, että mukana on "satunnaismatriiseja" generoivia toimintoja kuten `ranmat`. Joskus voi käydä niin, että eri ajokerroilla generoituukin sama satunnaismatriisi. Jos tätä ei haluta, pitää satunnaislukugeneraattori käynnistää uudelleen. Tämä tapahtuu komennolla `init_srand()` joka on määritelty kurssin www-sivulta löytyvässä tiedostossa `matutl02.cpp`.

```
/* FILE matutl02.cpp begins     */
/* Last updated 2002-01-10      */
/*                              */
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>

/*
get_int prompts the user to enter an integer
in the given range [low, up].
*/
void get_int(int &m,int low,int up)
{
  m=low-1;
  int count=0;
  while (((m<low)||(m>up))&&(count<3))
    {cout<< "Please enter integer in ["
         <<low<<","<< up<<"]: "<<endl;
    cin>>m; count++;}
  if ((m<low)||(m>up))
    {cout <<"Input failed."<<endl;
    abort();}
}

/*
getfname uses the seed fname to generate a name for
a file which does not exist already.
*/
char *getfname(char *fname)
```

```
{
  FILE *fp;
  int count=1;
  char *name,*beg,*end,*point;
  name=(char *) malloc(20);
  beg=(char *) malloc(20);
  sprintf(name,"%s",fname);
  sprintf(beg,"%s",fname);
  point=strchr(beg,'.');
  if(point!=NULL)
    *point='\0';
  end=".dat";
  while(!((fp=fopen(name,"r"))==NULL)){
    sprintf(name,"%s%d%s",beg,count++,end);
    fclose(fp);
  }
  return name;
}

/*
   init_srand initializes of the random number
   generator with system clock.
*/
void init_srand()
{  unsigned seed=time(NULL);
   srand(seed); }

/*
   rdm produces a random number in the range [low,up].
*/
DP rdm(DP low, DP up)
{ DP  x=rand(), der=DP( (up - low)/RAND_MAX);
  return (der*x + low); }

/*
   ranmat2 produces a random matrix with entries
   in the range [low,up]. The space for the matrix
   must be reserved in advance.
*/
void ranmat2(Mat_DP &a, DP low, DP up)
{ int m= a.nrows(),n=a.ncols();
  for (int i = 0; i <= m-1; i++)
    { for (int j = 0; j <= n-1; j++)
        {
           a[i][j] = rdm(low, up);
```

```
        }
    }
}

/*
  entermat
  prompts the user to enter a matrix entry by entry and
  displays the input on the screen. Matrix size must be
  known in advance and the space reserved for the matrix.
*/
void entermat( Mat_IO_DP &a)
{
  for (int j=0;j<a.nrows();j++)
    for (int k=0;k<a.ncols();k++)
      {cout << "Enter A[" <<j<<","<<k<<"]: ";
      cin>>a[j][k];
      cout << "The input you gave: "<<a[j][k]<<endl;
      } ;
}

/*
  entermat2
  prompts the user to enter a matrix entry by entry and
  displays the input on the screen. Mat_DP a(1,1);
  must be defined in the calling program.
  On return, after the call a=entermat2();
  a has the dimensions given.
*/

Mat_DP entermat2(const int low,const int up)
{
  int m,n;
  cout<<"Enter matrix size (m,n):";
  get_int(m,low,up);
  get_int(n,low,up);
  Mat_DP a(m,n);
 for (int j=0;j<a.nrows();j++)
    for (int k=0;k<a.ncols();k++)
      {cout << "Enter A[" <<j<<","<<k<<"]: ";
      cin>>a[j][k];
      cout << "The input you gave: "<<a[j][k]<<endl;
      } ;
 return a;
}
```

```
/*
   showvec displays a vector on the screen.
*/
void showvec( Vec_DP &a)
{
  cout.precision(8);
  cout<<endl<<"A vector with "<< a.size()<< " components:" <<endl;
  for (int j=0;j<a.size();j++)
     cout <<a[j]<<" ";
  cout<<endl;
}

/*
   showmat displays a matrix on the screen.
*/
void showmat( Mat_DP &a)
{
  int m=a.nrows(), n=a.ncols();
  cout.precision(8);
  cout<<endl<< m<< "x" <<n <<" matrix: "<<endl;
  for (int j=0;j<m;j++)
    for (int k=0;k<n;k++)
      {cout <<a[j][k]<<" ";
       if (k==n-1) cout<<endl;}
}
/*
   showmat2 displays a matrix on the screen with
   a specified format .
*/
void showmat2( Mat_DP &a, char *fmt)
{
  int m=a.nrows(), n=a.ncols();
  cout<<endl<< m<< "x" <<n <<" matrix: "<<endl;
  for (int j=0;j<m;j++)
    for (int k=0;k<n;k++)
      {printf(fmt,a[j][k]);
       if (k==n-1) cout<<endl;}
}

/*
   putmat stores a matrix in a file given by fname.
   Format as in getMat.
*/
void putmat( Mat_DP &a, char *fname)
{
```

```
  DP luku=0.0;
  int m=a.nrows(), n=a.ncols();
  ofstream fp(fname);
  if (fp.fail())
    {
      cout << "File  "<< fname
           <<" could not be opened.\n"<<endl;
      abort();
    }
  fp <<m <<"  "<<n <<endl;
  fp.precision(9);
  fp.width(16);
  for (int i=0;i<m;i++)
  for (int j=0;j<n;j++)
    {luku=a[i][j];
    fp<<luku<<" ";
    //    cout <<luku<<" ";
    if (j==n-1){fp<<endl;cout<<endl;}
    }
  cout<<"Matrix written in file "
      <<fname<<endl<<"=======<<endl;
  fp.close();
}

/* putmat2 writes a matrix into a file with the
   name obtained from getfname using the seed tied
 */

char *putmat2(Mat_DP &a,char *tied)
{
  FILE *fp;
  int i,j, m=a.nrows(), n=a.ncols();
  char *fname;
  fname=getfname(tied);
  if ((fp=fopen(fname,"w"))==NULL){
    fprintf(stderr,"Cannot open file %s\n",fname);
    exit(1);
  }
  fprintf(fp,"%d %d\n",m,n);
  for (i=0;i<m;i++){
    for (j=0;j<n;j++) fprintf(fp,"%25.16e ",a[i][j]);
    fprintf(fp,"\n");}
  fclose(fp);
  return fname;
}
```

```
/* getmat reads a matrix file stored in this format:
   2 3
   1.1  2.2 -3.3
   -4.4 5.5 -6.6
   Prior to the call of getmat, Mat_DP a(1,1);
   must be defined in the calling program
   on return a has the dimensions read from the file.
*/

Mat_DP getmat(char *fname)
{
  int m,n;
  DP d;
  ifstream fp(fname);
  if (fp.fail())
  {
    cout << "File  "<< fname <<" could not be opened.\n"<<endl;
    abort();
  }
  fp>>m; fp>>n;
  Mat_DP a(m,n);
  for (int i=0;i<m;i++)
    for (int j=0;j<n;j++)
    {
      fp >> d;
      a[i][j]=d;
    }
  fp.close();
  return a;
}


/*
  matmul multiplies two matrices a and b and stores the result in c.
*/
void matmul(Mat_DP &a, Mat_DP &b, Mat_IO_DP &c)
{
  int ma=a.nrows(),na=a.ncols(),mb=b.nrows(),nb=b.ncols();
  if (na !=mb)
    {
      cout<<"Incompatible matrix dimensions: "<<
                  " na, mb= "<<na<<" "<<mb<<endl;
      abort();
    }
```

```
  DP s;
  for (int i=0;i<ma;i++)
    for (int j=0;j<nb;j++)
      {
        s=0.0;
        for (int k=0;k<na;k++)
          s+=a[i][k]*b[k][j];
        c[i][j]=s;
      }
}

/*
  matsum adds two matrices a and b and stores the result in c.
*/
void matsum(Mat_DP &a, Mat_DP &b, Mat_IO_DP &c)
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), mb=b.nrows(), nb=b.ncols();
  if ((ma !=mb) ||( na !=nb))
    {
      cout<<"Incompatible matrix dimensions: "
          <<" ma, na= "<<ma<<" "<<na
          <<" mb, nb= "<<mb<<" "<<nb <<endl;
      abort();
    }
  for (int i=0;i<ma;i++)
    for (int j=0;j<na;j++)
      {
        c[i][j]=a[i][j]+b[i][j];
      }
}


/*
  scalmatmul multiplies a matrix a by s and stores result in b.
*/
void scalmatmul(Mat_DP &a, DP s,Mat_DP &b)
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols();
  for (int i=0;i<ma;i++)
    for (int j=0;j<na;j++)
      {
        b[i][j]=s*a[i][j];
      }
}
```

```
/*
  scalmatsum adds a scalar to a matrix a by s
  and stores result in b.
*/
void scalmatsum(Mat_DP &a, DP s,Mat_DP &b)
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols();
  for (int i=0;i<ma;i++)
    for (int j=0;j<na;j++)
      {
        b[i][j]=s+a[i][j];
      }
}

/*
  matvecmul multiplies a matrix a by a vector v
  and stores result in b.
*/
void matvecmul(Mat_DP &a, Vec_DP &v,Vec_DP &b)
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), nv=v.size(), nb=b.size();
  DP s=0.0;
  if ((na !=nv) ||(ma != nb))
    {
      cout<<"Incompatible factors, ma,na,nv, nb ="
          <<ma<<", "<<na<<", "<<nv<<nb<<", "<<nb<<endl;
      abort();
     }
  for (int i=0;i<ma;i++)
      {
      s=0.0;
      for (int j=0;j<na;j++) s+=a[i][j]*v[j];
      b[i]=s;
      }
}
/*
  vecmatmul multiplies a vector by a matrix
  and stores result in b.
*/
void vecmatmul(Vec_DP &v,Mat_DP &a, Vec_DP &b)
{

  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), nv=v.size(), nb=b.size();
  DP s=0.0;
```

```
  if ((na !=nb) ||(ma != nv))
    {
      cout<<"Incompatible factors in vecmatmul, ma,na,nv, nb ="
          <<ma<<", "<<na<<", "<<nv<<nb<<", "<<nb<<endl;
      abort();
     }
  for (int i=0;i<b.size();i++)
      {
      s=0.0;
      for (int j=0;j<na;j++) s+=a[j][i]*v[j];
      b[i]=s;
      }
}

/*
 mnormp returns matrix norm:
 (Sum_{i,j} |a(i,j)|^{p})^{1/p}
*/
DP mnormp(Mat_DP &a, DP p)
{
  DP s=0.0;
  int m= a.nrows(), n= a.ncols();
  for (int i=0;i<m;i++){
    for (int j=0;j<n;j++){
      s=s+pow(fabs(a[i][j]),p);}}
  return pow( s, 1.0/p) ;
}


/* vnormp returns vector norm:
   (Sum_{i} |a(i)|^{p})^{1/p} */
DP vnormp(Vec_DP &a, DP p)
{ DP s=0.0;
  int m= a.size();
  for (int i=0;i<m;i++)
       s=s+pow(fabs(a[i]),p);
  return pow( s, 1.0/p) ;
}

/*
 ones returns matrix with all elements = 1,
 of given size
*/
void ones(Mat_DP &a)
{
```

```
  int  m=a.nrows(), n=a.ncols();
  for (int i = 0; i < m; i++)
    {
      for (int j = 0; j < n; j++)
        {
          a[i][j] = 1.0;
        }
    }
}

/*
  unitmat returns a matrix with elements =1 on diagonal,
  0 elsewhere, of given size
*/
void unitmat(Mat_DP &a)
{
  int  m=a.nrows(), n=a.ncols();
  for (int i = 0; i < m; i++)
    {
      for (int j = 0; j < n; j++)
        {
          a[i][j] = 0.0; if (i==j) a[i][j] = 1.0;
        }
    }
}

/* Transpose of a matrix */
void transp(Mat_DP &a, Mat_DP &aT)
{
  int m=a.nrows(), n=a.ncols();
  for (int i = 0; i < m; i++)
    for (int j = 0; j < n; j++)
      aT[j][i] = a[i][j];
}

/* Determinant of a matrix */
DP detmat(Mat_DP &a)
{
  int m=a.nrows(), n=a.nrows();
  if ((m!=n)||(m<=1))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in detmat. "
         <<endl;
    abort();
     }
  n=m;
```

```
  Mat_DP aa=a;
  Vec_INT indx(n);
  DP t;
  NR::ludcmp(aa,indx, t);
  for (int j=0;j<n;j++){ t = t*aa[j][j];}
  return t;
}


DP residual(Mat_DP &a, Vec_DP &x, Vec_DP &b)
{
  int ma=a.nrows(),na=a.ncols();
  if ((na!=x.size())||(ma!=b.size()))
    {cout<<"Argument error in residual"<<endl;
     abort();}
  Vec_DP c(ma);
  matvecmul(a,x,c);
  for (int i=0;i<c.size();i++) c[i]=c[i]-b[i];
  return vnormp(c,2.0);
}

/* Overloading sum operator for matrices */
inline Mat_DP operator+(Mat_DP &a, Mat_DP &b)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),a.ncols());
  matsum(a,b,c);
  return c;
}

/* Overloading product operator for matrices */
inline Mat_DP operator*(Mat_DP &a, Mat_DP &b)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),b.ncols());
  matmul(a,b,c);
  return c;
}

/* Overloading product operator for matrix times scalar */
inline Mat_DP operator*(Mat_DP &a,DP x)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),a.ncols());
  scalmatmul(a,x,c);
  return c;
}
```

```
/* Overloading product operator for scalar times matrix  */
inline Mat_DP operator*(DP x,Mat_DP &a)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),a.ncols());
  scalmatmul(a,x,c);
  return c;
}

/* Overloading minus operator for matrices  */
inline Mat_DP operator-(Mat_DP &a, Mat_DP &b)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),a.ncols());
  Mat_DP bb=(-1.0)*b;
  matsum(a,bb,c);
  return c;
}
/* Overloading plus operator for matrix plus scalar  */
inline Mat_DP operator+(Mat_DP &a,DP x)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),a.ncols());
  scalmatsum(a,x,c);
  return c;
}
/* Overloading minus operator for matrix minus scalar  */
inline Mat_DP operator-(Mat_DP &a,DP x)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),a.ncols());
  scalmatsum(a,-x,c);
  return c;
}
/* Overloading plus operator for scalar plus matrix */
inline Mat_DP operator+(DP x,Mat_DP &a)
{
  Mat_DP c(a.nrows(),a.ncols());
  scalmatsum(a,x,c);
  return c;
}

/* */
/* Overloading ! operator to denote matrix transpose */
inline Mat_DP operator!(Mat_DP &a)
{
  Mat_DP b(a.ncols(),a.nrows());
  transp(a,b);
  return b;
```

```
}
/* Overloading ^ operator for matrix power */
inline Mat_DP operator^(Mat_DP &a, unsigned int b)
{
  int m=a.nrows(), n=a.ncols();
  if(m!=n)
  {
    cerr<<"Incompatible matrix dimensions.\n";
    abort();
  }
  Mat_DP d(m,n);
  if(b>0) d=a;
  for(int i=2;(unsigned int)i<=b;i++)
    d=d*d;
  return d;
}
/* Overloading << operator for matrix output */
ostream &operator<<(ostream &stream, const Mat_DP &a)
{
  int m=a.nrows(), n=a.ncols();
  for (int j=0;j<m;j++)
    for (int k=0;k<n;k++)
      {
        stream << fixed<<scientific<<setw(14);
        stream << setprecision(8)<<(a[j][k]) << " ";
        if (k==n-1)
          stream<<endl;
      }
  return stream;
}

/* Overloading << operator for vector output */
 ostream &operator<<(ostream &stream, const Vec_DP &a)
{
  stream << fixed<<scientific<<setw(14);
  for (int j=0;j<a.size();j++)
      {
        stream << setprecision(8)<<(a[j]) << " ";
      }
  stream<<endl;
  return stream;
}


/* cond gives the condition number of a square matrix */
```

```
DP cond(Mat_DP &a)
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols();
  if ((ma!=na))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in cond. "
         <<endl;
    abort();
    }
  Vec_DP w(na);
  Mat_DP u(ma,na),v(na,na);
  u=a;
  NR::svdcmp(u,w,v);
  // find maximum singular value
  DP wmax=w[0], wmin=w[0];
  int n=ma;
  for (int k=0;k<n;k++)
   { if (w[k] > wmax) wmax=w[k];
   if (w[k] < wmin) wmin=w[k];}
  return wmax/(wmin+1e-100);
}
/* invmat returns matrix inverse of a square matrix */
void invmat(Mat_DP &a, Mat_DP &inva)
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), mi=inva.nrows(),
      ni=inva.ncols() ;
  if ((ma!=na)||(mi !=ni) ||(ma!=mi))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in invmat. "
         <<endl;
    abort();
     }
  int n=ma;
  Mat_DP ai(n,n), sol(n,1);
  sol=1.0;
  ai=a;
    NR::gaussj(ai,sol);
    inva=ai;
}

/* FILE matutl02.cpp begins                                */
```

```
/* FILE: myutl4.cpp begins                                    */
// g++ myutl4.cpp -I../utils  -L../lib -o a -lm -lnr
/* USAGE: ./a <myutl4.inp > a.jnk where myutl4.inp is
2 3
1.2 3.4 -2.1 6.4 0.2 3.12
3 2
-2.1 6.4 0.2 3.12 0.03 -0.12
 */
/*
  The purpose of this program is to demonstrate the
  matrix and vector classes and their properties, as
  defined in the file matutl02.cpp.
  Some operations, such as matrix product can be
  computed in two ways, with matmul or with
  the overloaded * operator.
*/

#include <stdlib.h>
#include <cstdlib>
#include <cstdio>
/*#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip> */
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"

int main(void)
{
  int j,k,l,m,n;
  const char *fname="myutl1.dat";
  init_srand();  // Initialize the random number generator.
  Mat_DP  a(1,1);
  a=entermat2(2,4);  // The size of a will change!!
  cout<<a;
  Mat_DP d(4,2),e(2,4),f(4,4);
```

```
  ranmat2(d, -10.0,10.0);
  ranmat2(e, -10.0,10.0);
  cout<<"Random matrix: "<<endl;
  showmat2(d," %8.4lf%");
  showmat2(e," %8.4lf%");
  f=d*e;
  showmat2(f," %10.6e");
  fname="myutl1.dat";
  fname=putmat2(f,fname);
  cout<<"Matrix f saved in file "<< fname <<endl;
  Mat_DP g(1,1), h(1,1);
  g=getmat(fname);
  h=g;  // Tehdaan h ja g samankokoisiksi
  cout<<endl<<"Matrix g read from the file: "<<fname;
  showmat(g);
  h=f-g;
  cout<< "Difference h=f-g of original matrix \n"<<
         "and the one read from the file:" <<
         " \n"<<endl;
  showmat2(h," %8.4e");
  printf("norm_2(h)= %10.4e\n ", mnormp(h,2));
  Vec_DP dd(4),vv(4) ;
  dd[0]=0.2313;   dd[1]=-0.342342;  dd[3]=2.23132;
  matvecmul(f,dd,vv);
  showvec(vv);
  cout
  <<"\nTest of accuracy in 10x10 matrix inversion: \n"<<endl;
  Mat_DP a1(10,10), b(10,10), ai(10,10), u(10,10);
  unitmat(u);
  ranmat2(a1,-1,1);
  invmat(a1,ai);
  b=a1*ai;
  a1=b-u;
  printf("norm(a*inv(a)-id)= %10.4e\n ",mnormp(a1,2));
  return 0;
}
/* FILE: myutl4.cpp ends                                    */
```

Ohjelman `myutl4.cpp` kääntäminen tapahtuu tavalliseen tapaan kommenteista ilmenevällä tavalla. Ohjelma voidaan ajaa komennolla `./a`, jolloin syötteet annetaan näppäimistöltä ja tulostus tapahtuu kuvaruudulle. Toinen mahdollisuus on ohjata syöte ja tulostus tiedostojen kautta tapahtuvaksi seuraavasti:

```
./a <myutl4.inp >myutl4.dat
```

Tiedosto myutl4.inp:

```
2 3
1.435 -0.97879 2.00564 -4.55343 3.0004545 0.0678
3 2
1.756 -2.8888 0.3243 -0.11 2.33 6.33
```

Tiedosto myutl4.dat:

```
Enter matrix size (m,n):Please enter integer in [2,6]:
Please enter integer in [2,6]:
Enter A[0,0]: The input you gave: 1.2
Enter A[0,1]: The input you gave: 3.4
Enter A[0,2]: The input you gave: -2.1
Enter A[1,0]: The input you gave: 6.4
Enter A[1,1]: The input you gave: 0.2
Enter A[1,2]: The input you gave: 3.12
           1.2            3.4           -2.1
           6.4            0.2           3.12
Random matrix:

4x2 matrix:
  -5.5544   9.6048
   9.1445   8.3267
   8.3998   5.0998
  -9.4150   7.6505

2x4 matrix:
   3.6151   1.9018   7.8569   9.0707
  -8.0862  -3.9453   3.9931  -5.6617

4x4 matrix:
 -9.774543e+01 -4.845769e+01 -5.287328e+00 -1.047618e+02
 -3.427241e+01 -1.545997e+01 1.050967e+02 3.580391e+01
 -1.087161e+01 -4.145204e+00 8.636056e+01 4.731865e+01
 -9.589913e+01 -4.808961e+01 -4.342255e+01 -1.287150e+02
Matrix f saved in file myutl1.dat

Matrix g read from the file: myutl1.dat
4x4 matrix:
-97.745426 -48.457686 -5.2873278 -104.76183
-34.272411 -15.459971 105.09673 35.803906
-10.871607 -4.1452043 86.360556 47.318648
-95.899126 -48.089609 -43.422552 -128.71496
```

```
Difference f-g of original matrix
and the one read from the file:


4x4 matrix:
 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00
 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00
 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00
 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00 0.0000e+00
norm_2(h)= 0.0000e+00

A vector with 4 components:
-239.77659 77.25536 104.48752 -292.92264

Test of accuracy in 10x10 matrix inversion:

norm(a*inv(a)-id)= 1.7708e-15
```

1.26. Numeerisen lineaarialgebran perusoperaatiot. Kuten yo. ohjelmasta `myutl4.cpp` ja sen tulosteesta ilmenee, monet matriisialgebran operaatiot voidaan C++ -koodissa esittää lähes samoin merkinnöin kuin matematiikassa. Esimerkkejä ovat matriisien summa, tulo, vakiolla kertominen, ja matriisinormi sekä neliömatriiseille käänteismatriisi ja determinantti. Näiden ohella tarvitsemme jatkossa mm. sarakkeiden tai rivien vaihtoa sekä matriisien muuntamista erityisiin muotoihin tarkoituksena sovellukset lineaarialgebran ongelmiin erityisesti lin. yht.ryhmän ratkaisuun ja ominaisarvotehtäviin. Lineaariset yhtälöryhmät, joissa kerroinmatriisilla on erityinen muoto, voidaan usein ratkaista helpommin tai tehokkaammin kuin yleiset lin. yhtälöryhmät. On tarpeen tarkastella niitä esivalmisteluna yleiseen tapaukseen.

1.27. Erityistyyppiset matriisit. Tärkeitä matriisityyppejä numeerisessa laskennassa ovat:

- yläkolmio-, alakolmio-, lohkomatriisit. Yläkolmiomatriisissa $a_{i,j} = 0$ jos $i > j$.

- nauhamatriisi, p-diagonaalimatriisi ($a_{i,j} = 0$, kun $|i - j| \geq p$)

- symmetrinen ($A^T = A$), ortogonaalinen matriisi ($A^T = A^{-1}$)

- riveittäin lävistäjävoittoinen (eli diagonaalidominoiva) (ts. $|a_{i,i}| > \sum_{k=1,k\neq i}^{n} |a_{i,k}|$ kaikilla $i = 1, 2, ..., n$)

-permutointimatriisi saadaan vaihtamalla identtisessä matriisissa sarakkeet k ja h. Se on ortogonaalinen.

-neliömatriisi A on positiivisesti definiitti (semidefiniitti) jos $x^T Ax > 0$ (vast. $x^T Ax \geq 0$) kaikilla $x \in R^n \setminus \{0\}$.

1.28. Lause (Choleskyn hajoitelma) $n \times n$ matriisi A on positiivisesti definiitti jos ja vain jos on olemassa säännöllinen $n \times n$ alakolmiomatriisi L positiivisin diagonaalialkioin se. $A = LL^T$.

1.29. Kokeelliset virhearviot. Keskeinen osa ohjelmointityössä on ohjelman toiminnan oikeellisuuden varmistus. Matriisilaskennassa testauksen osana voidaan tuottaa virhearvioita kokeellisesti satunnaismatriisien avulla. Tarkastamme kahta esimerkkiä.

Olkoon A $m \times n$ matriisi. Oletamme, että meillä on $m \times m$ matriisi Q ja $m \times n$ matriisi R, joilla pitäisi olla voimassa esityksen $A = QR$. Joukolle satunnaismatriiseja A voimme tuottaa ko. esityksen ja muodostaa erotuksen $||A - QR||$ ja käyttää suurinta erotuksen arvoa virhearviona.

Oletamme, että meillä on ohjelma `LINsolve(a,b,x)`, jonka pitäisi ratkaista lin. yhtälöryhmä $Ax = b$ missä A on $n \times n$ matriisi. Muodostamme satunnaismatriisille A vektorin z jonka kaikki komponentit ovat tunnettuja (esim. $= 1$) ja $b = Az$. Olkoon `x` `LINsolve`:n tuottama numeerinen ratkaisu. Merkitään $r_1 = ||z - x||$ ja $r_2 = ||Ax - b||$. Silloin r_1 on numeerisen ratkaisun virhe ja r_2 ns. residuaali. Molempia voidaan käyttää virheen arviointiin, jos ne tunnetaan. Huomaa, että r_2 voidaan laskea aina, kun taas r_1 pelkästään siinä tapauksessa, että tarkka ratkaisu tiedetään etukäteen.

Molempien esimerkkien tapauksessa virhe on pieni. Kuten luvussa 2 tullaan näkemään, lin. yhtälöiden ratkaisuissa virheen suuruusluokka on useasti 10^{-14} tai parempi.

1.30. Matriisin kuntoisuusluku. Numeerisen matriisialgebran tär-

keimpiä käsitteitä on $n \times n$ matriisin ns. *kuntoisuusluku* (engl. condition number), joka kuvastaa matriisin numeerisia ominaisuuksia. Jos A on neliömatriisi, niin $cond(A) \geq 1$ ja numeeriset ominaisuudet huononevat $cond(A)$:n kasvaessa. Kuntoisuuslukua voitaisiin kutsua myös herkkyysparametriksi tai häiriöalttiudeksi, sillä kuten tulemme näkemään jatkossa, se kuvastaa virheen voimistumista lineaarikuvauksessa. Jatkossa tulemme esittelemään lyhyesti $cond(A)$:n käyttöä. Huomaa, että $cond(A)$ oli jo osa `matutl02.cpp` pakettia.

```
/* FILE: mycond.cpp begins.                                  */
/*  g++ mycond.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr     */

#include <stdlib.h>
#include <cstdlib>
#include <cstdio>

using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"

void ShowUWV(Mat_DP &a)
{
  int ma=a.nrows(),na=a.ncols();
  Mat_DP u(ma,na), v(na,na),w1(na,na);
  Vec_DP w(na);
  u=a;
  w1=0.0;
  cout<<"A= "<<endl;      showmat2(a,"% 10.5f ");
  NR::svdcmp(u,w,v);
  for (int i=0;i<na;i++) w1[i][i]=w[i];
  cout<<"u= "<<endl;      showmat2(u, "%10.5lf ");
  cout<<"w^T= "<<w <<endl;
  cout<<"v= "<<endl;
  showmat2(v, "%10.5lf ");
  /* Estimate SVD decomposition error: */
  Mat_DP tmp1(ma,na), tmp2(na,na), tmp3(ma,na);
  matmul(u,w1,tmp1);             transp(v,tmp2);
  matmul(tmp1,tmp2,tmp3 );       tmp1=a-tmp3;
  printf("norm(A- u *w * v^T) = %10.4e\n",mnormp(tmp1,2.0));
}
int main()
{
```

```
  int ma=3,na=3,mb=5,nb=5;
  Mat_DP a(ma,na), b(mb,nb);
  double con1, con2;
  ranmat2(a,0.1, 1.5);
  ShowUWV(a);
  con1=cond(a);
  printf("cond(A) = %16.4e \n",con1);
  unitmat(b); b[0][0]=17.0;
  cout <<"B= "<<endl;  showmat2(b,"% 8.5g ");
  con2=cond(b);
  printf("cond(B) = %16.4e \n",con2);
  return 0;
}
/* FILE: mycond.cpp ends.                                          */
```

Testiajon tuottama tulostus:

```
A=

3x3 matrix:
   1.27626    0.65214    1.19634
   1.21782    1.37631    0.37657
   0.56931    1.17552    0.48888
u=

3x3 matrix:
  -0.61134   -0.04273   -0.79021
  -0.64003    0.61397    0.46196
  -0.46543   -0.78817    0.40269
w^T=      2.8470869 0.33740483 0.85421621

v=

3x3 matrix:
  -0.64088    0.72452   -0.25366
  -0.64159   -0.32414    0.69519
  -0.42146   -0.60828   -0.67258
norm(A- u *w * v^T) = 8.1016e-16
cond(A) =       8.4382e+00
B=

5x5 matrix:
      17        0        0        0        0
       0        1        0        0        0
       0        0        1        0        0
       0        0        0        1        0
```

```
       0         0         0         0         1
cond(B) =       1.7000e+01
```

1.31. Kolmiomatriisit. Lin. $n \times n$ yhtälöryhmän $Ax = b$ ratkaisu helpottuu oleellisesti, jos A on joko yläkolmiomatriisi U tai alakolmiomatriisi L. Ensimmäisessä tapauksessa voimme viimeisestä yhtälöstä ratkaista x_n:n, sijoittaa sen toiseksi viimeiseen ja ratkaista x_{n-1} :n, "peruuttaen" kunnes kaikki komponentit on ratkaistu. Toisessa tapauksessa voimme taas edetä päinvastaisessa järjestyksessä.

Jos $n \times n$ matriisilla A on hajoitelma $A = LU$ missä L ja U vastaavasti ovat säännöllisiä ala- ja yläkolmiomatriiseja, niin yhtälöryhmän $Ax = y$ ratkaiseminen palautuu seuraaviksi kahdeksi yhtälöryhmäksi

$$Lz = y, \quad Ux = z.$$

Molemmat voidaan ratkaista edelläkuvatulla menettelyllä.

1.32. Choleskyn hajoitelma. Edellä kuvattua hajoitelmaa $n \times n$ matriisille ei aina ole olemassa. Eräissä erikoistapauksissa hajoitelma voidaan muodostaa helposti. Choleskyn lauseen nojalla näin on erityisesti silloin kun A on positiivisesti definiitti ja symmetrinen.

Allaoleva algoritmi kirjoittaa A:n päälle matriisin L.

Algorithm (Cholesky factorization)

```
for k = 1 to n                          { loop over columns }
    a_kk = sqrt(a_kk)
    for i = k + 1 to n
        a_ik = a_ik / a_kk              { scale current column }
    end
    for j = k + 1 to n                  { from each remaining column,
        for i = k + 1 to n                subtract multiple
            a_ij = a_ij - a_ik * a_jk     of current column }
        end
    end
end
```

Kohdan 1.31 mukaan Choleskyn hajoitelman avulla voimme ratkaista yhtälöryhmän $Ax = y$ positiivisesti definiitille matriisille A.

Yo. muodossa algoritmi on implementoitu ohjelmaan `mychol3.cpp` joka löytyy kurssin www-sivulta. Ks. myös `NR::cholsl, NR::choldc`.

1.33. Householderin QR hajoitelma. Numeerisen lineaarialgebran tärkeimpiä algoritmeja on $m \times n, m \geq n$, matriisin A ns. QR hajoitelma joka antaa esityksen $A = QR$ missä Q on $m \times m$ ortogonaalinen matriisi ja R $m \times n$ matriisi jolla diagonaalin alapuoliset alkiot ovat nollia.

Hajoitelmaan päästään tekemällä peräkkäisiä ortogonaalimuunnoksia n kappaletta. Muunnos $H_j, j = 1, ..., n$ nollaa A:n diagonaalin alapuoleiset komponentit sarakkeessa j kuitenkin siten, että ko. sarakevektorin pituus säilyy muunnoksessa. Kukin tällainen ortogonaalimuunnos voidaan tulkita peilaukseksi, kuten alla esitetään.

Householderin muunnos on $m \times m$ matriisi, jolla on muoto

$$H = I - 2\frac{vv^T}{v^T v}$$

missä $v \neq 0$. Silloin $H = H^T = H^{-1}$, joten H on symmetrinen ja ortogonaalinen. Haluamme valita annetulle vektorille a vektorin v, jolle kaikki muut paitsi ensimmäinen komponentti Ha:sta on nolla, siis $Ha = \alpha e_1$ jollakin α. Silloin

$$\alpha e_1 = Ha = (I - 2\frac{vv^T}{v^T v})a = a - 2v\frac{v^T a}{v^T v},$$

$$\Rightarrow v = (a - \alpha e_1)\frac{v^T v}{2v^T a}.$$

Skalaaritekijäksi valitaan 1 jolloin $v = a - \alpha e_1$. Koska H säilyttää normin pitää valita $\alpha = \pm|a|$. Merkitsevien numeroiden kumoutumisen ehkäisemiseksi valitaan $\alpha = \text{sign}(a_1)|a|$.

Tavallinen sovellustilanne on pns-yhtälöiden ratkaiseminen, joka johtaa yhtälöryhmään $Ax = b$ missä A on $m \times n, m \geq n$. Yhtälöryhmä säilyy samana kun se kerrotaan H_1:lla: $H_1 Ax = H_1 b$. Jatkaen näin saadaan se lopulta muotoon

$$H_n \cdots H_1 Ax = Q^T b; \quad Q^T = H_n \cdots H_1.$$

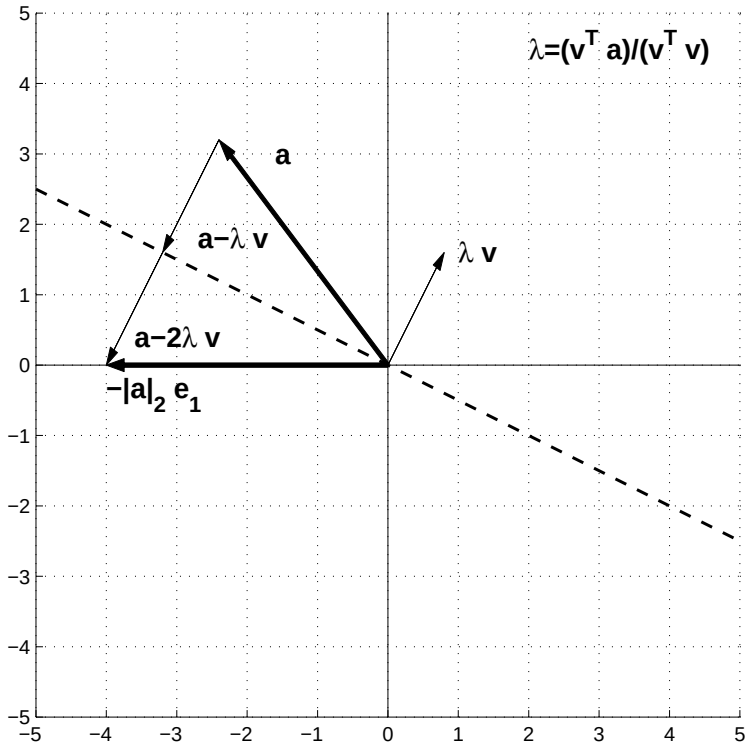
josta x voidaan helposti ratkaista koska $Q^T A$:n diagonaalin alapuoleiset alkiot ovat nollia. Ratkaisuun ei tarvita Q:ta.

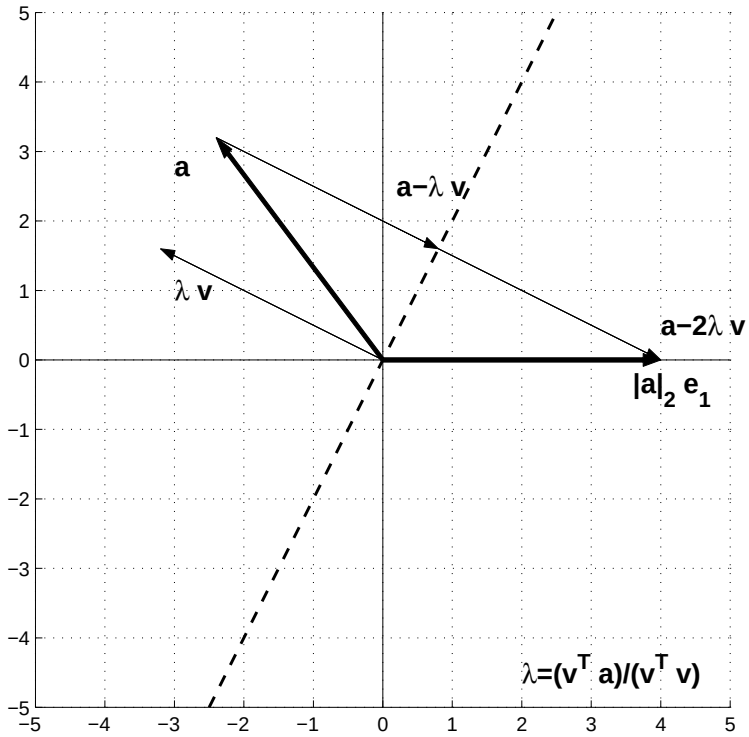
Allaoleva algoritmi tuottaa A matriisista $m \times n, m \geq n$, peräkkäisillä ortogonaalimuunnoksilla matriisin R. (Matriisia Q ei konstruoida.)

Algoritmi on implementoitu ohjelmaan `myhouse2.cpp`, ja siihen palataan myöhemmin.

Algorithm (QR Factorization)

for $k = 1$ **to** n {loop over columns }
  $\alpha_k = -\text{sign}(a_{kk})\sqrt{a_{kk}^2 + \ldots + a_{mk}^2}$ {compute Householder
  $\mathbf{v}_k = [0 \ldots 0 \;\; a_{kk} \ldots a_{mk}]^T - \alpha_k \mathbf{e}_k$ vector for current col }
  $\beta_k = \mathbf{v}_k^T \mathbf{v}_k$
  if $\beta_k = 0$ **then** {skip current column
    continue with next k if it's already zero }
  for $j = k$ **to** n {apply transformation
    $\gamma_j = \mathbf{v}_k^T \mathbf{a}_j$ to remaining
    $\mathbf{a}_j = \mathbf{a}_j - (2\gamma_j/\beta_k)\mathbf{v}_k$ submatrix }
  end
end


λ=(v^T a)/(v^T v)
a
a−λ v
λ v
a−2λ v
−|a|_2 e_1


a
a−λ v
λ v
a−2λ v
|a|_2 e_1
λ=(v^T a)/(v^T v)

1.34. Iteratiiviset algoritmit. Tavanomaisilla lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisumenetelmillä on yhteinen piirre: ne perustuvat lineaarialgebran tuloksiin ja tarvittavien laskutoimitusten määrä, eli laskennan vaativuus, on luokkaa n^3, jos yht.ryhmän koko on $n \times n$. Laajojen yhtälöryhmien tapauksessa voi kuitenkin olla parempaa käyttää ns. *iteratiivisia menetelmiä.* Perusajatuksena on kirjoittaa $n \times n$ yhtälöryhmä toisin:

$$Ax = b \Leftrightarrow x = Tx + c,$$

ja soveltaa iteraatiota $x^{(k+1)} = Tx^{(k)} + c$, joka yleistää yhden muuttujan funktion tapauksessa esiteltyä kiintopisteiteraatiota. Hajotelma löytyy seuraavasti. Kirjoitetaan $A = L+D+U$ (lower, diagonal, upper; tässä diagonaalialkiot mukana pelkästään D:ssä), jolloin

$$Ax = b \Leftrightarrow Dx = -(L + U)x + b.$$

Siis $T = D^{-1}(-(L + U))$ ja $c = D^{-1}b$. Komponenttimuodossa saadaan esitys

$$x_j^{(k+1)} = (b_j - (L + U)x_j^{(k)})/a_{jj}, j = 1, 2, .., n,$$

tai yhtäpitävästi

$$(J) \qquad x_j^{(k+1)} = (b_j - \sum_{i=1, i \neq j}^{n} a_{ij}x_i^{(k)})/a_{jj},$$

missä yläindeksi vastaa iteraation numeroa. Iteraatio on nimeltään *Jacobin iteraatio.* Tämä iteraatio suppenee kaikilla alkuarvoilla vain tietyin matriisia A koskevin oletuksin (vrt. seur. lause). Laskennan vaativuus riippuu nyt halutusta tarkkuudesta ja kaavan (J) vaativuudesta. Huomaa: jos matriisi A on harva (nollasta eroavien termien määrä $O(n)$), voidaan kaavan (J) summaa tehostaa rajoittumalla nollasta eroaviin termeihin.

Jacobin menetelmä on lähtökohtana eräille muille iteratiivisille menetelmille. Ns. *Gaussin-Seidelin iteraatio* perustuu seuraavaan huomioon. Jos kaavassa (J) laskenta tapahtuu indeksin j mukaan kasvavassa järjestyksessä ja on jo laskettu arvoilla $j = 1, ..., j_0$,

niin vaiheessa $j_0 + 1$ voitaisiin termien $x_j^{(k)}, j = 1, ..., j_0$, asemasta käyttää termejä $x_j^{(k+1)}, j = 1, ..., j_0$. Toisin sanoen, Gaussin-Seidelin menetelmässä käytetään kaavaa:

$$(GS) \qquad x_j^{(k+1)} = (b_j - \sum_{i=1, i<j}^{n} a_{ij} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=1, i>j}^{n} a_{ij} x_i^{(k)})/a_{jj}.$$

Mainitsemme vielä kolmannenkin iteratiivisen menetelmän ns. *SOR-iteraation* (successive overrelaxation). Siinä kaava (GS) korvataan seuraavalla:

(SOR)

$$x_j^{(k+1)} = (1 - \omega) x_j^{(k)} + \omega(b_j - \sum_{i=1, i<j}^{n} a_{ij} x_i^{(k+1)} - \sum_{i=1, i>j}^{n} a_{ij} x_i^{(k)})/a_{jj}.$$

SOR-menetelmä suppenee sopivilla parametrin $\omega \in (0, 2)$ arvoilla nopeammin kuin Gaussin-Seidelin menetelmä.

Riittäviä ehtoja iteraatioiden (J) ja (GS) suppenemiselle on esitetty mm. diagonaalipainotteisille matriiseille. Näille matriiseille on aina olemassa myös käänteismatriisi.

1.35. Lause. [Stoer-Bulirsch, Thm 8.2.6, 8.2.12] Jacobin ja Gaussin-Seidelin iteroinnit suppenevat kaikille matriiseille A, joille pätee riveittäinen diagonaalinen dominointiehto

$$|a_{ii}| > \sum_{k=1, k \neq i}^{n} |a_{ik}|, i = 1, 2, ..., n.$$

Seuraava ohjelma implementoi sekä Jacobin että Gaussin-Seidelin iteraatiot lineaarisen $n \times n$ yhtälöryhmän ratkaisemiseksi. Generoimme ensin jonkin satunnaismatriisin A ja kasvatamme sen diagonaalialkioita, niin että yo. suppenemislauseen ehto tulee voimaan. Iteroinnin alkuarvona on origo. Lopuksi vertaamme löydettyä ratkaisua alunperin jo tiedossamme olevaan juureen saadaksemme arvion virheestä. Esilläolevassa tapauksessa molemmat iteraatiot johtavat samaan juureen, ja huomaamme, että Gaussin-Seidelin iteraatiossa suppeneminen on hieman nopeampaa.

```
/* FILE: myjgsit.cpp begins.                              */
/*  g++ myjgsit.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr  */
/* Jacobi/Gauss-Seidel iterations to solve
   a linear system */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"

void Jacobi_iter(Mat_DP &a, Vec_DP &b,
Vec_DP &x, Vec_DP &xold)
{
  DP s;
  int i,j,ma=a.nrows();
  if ((ma!=a.ncols())||(ma!=b.size())||
              (ma!=x.size())||(ma!=xold.size()))
    {cout<<"Argument error in Jacobi_iter\n"<<endl;
     abort();
    }
  for (i=0;i<ma;i++) {  /* This is Jacobi iteration */
    s=0.0;
    for (j=0;j<ma;j++)
      if (i != j) s+=a[i][j]*xold[j];
      xold[i]=x[i];
      x[i]=(b[i]-s)/a[i][i];
   }
}

void GaussSeidel_iter(Mat_DP &a, Vec_DP &b,
Vec_DP &x, Vec_DP &xold)
{
  DP s;
  int i,j,ma=a.nrows();
  if ((ma!=a.ncols())||(ma!=b.size())||
            (ma!=x.size())||(ma!=xold.size()))
    {cout<<"Argument error in GaussSeidel_iter\n"<<endl;
     abort();
```

```
    }

  for (i=0;i<ma;i++) {  /* This is Gauss-Seidel iteration */
    s=0.0;
    for (j=0;j<ma;j++){
      if (j <=i-1) s+=a[i][j]*x[j];
      if (j >=i+1) s+=a[i][j]*xold[j];}
      xold[i]=x[i];
      x[i]=(b[i]-s)/a[i][i];
    }
}

int main()
{
  int ma;
  int i,j,k,ikind,ikindold,new1 ;
  ma=6;
  Mat_DP a(ma,ma);
  Vec_DP b(ma),x(ma),xold(ma),sol(ma);
  DP er,s;
  init_srand();       /* Give some values for a and b */
  ranmat2(a,-0.99, 0.99);
  for (i=0;i<ma;i++)
    for (j=0;j<ma;j++)
      a[i][j]=ceil(10*a[i][j]);
  /* We give integer values for the entries of a */
  for (i=0;i<ma;i++)
    {s=0.0;
    for (j=0;j<ma;j++) if (j !=i) s= s+fabs(a[i][j]);
    if (fabs(a[i][i]) < s ) a[i][i]=s+ma/2;}
  /* Diag. entries are increased a bit, to ensure
     convergence of the iteration */
  cout<<"Matrix a ="<<endl;
  showmat2(a,"% 10.5f ");
  /* We make a solution in integer components */
  for (i=0;i<ma;i++) sol[i]=(int)(ma/2)-i;
  /* and, the corresponding RHS: */
  matvecmul(a,sol,b);
  for (i=0;i<ma;i++) {x[i] =0.0; xold[i]=0.0;}
  new1=0; ikind=0;
  do {
    ikindold=ikind;
    printf("Enter iteration: (1) Jacobi, (2) Gauss-Seidel \n");
    scanf("%ld",&ikind);
    printf("\n ***\n ikind = %ld \n",ikind);
```

```
    for (i=0;i<ma;i++) printf("      x[%ld]",i);
    printf("\n");
                /* Restart with x=0 if ikind !=ikindold */
    if (ikind != ikindold)
      for (i=0;i<ma;i++) {x[i] =0.0; xold[i]=0.0;}
    printf("\n 1 :");
    for (i=0;i<ma;i++) printf(" %9.6f",x[i]);
    printf("\n");
    for (k=1;k<=40;k++)
      {
        if (ikind ==1) Jacobi_iter(a,b,x,xold);
        if (ikind ==2) GaussSeidel_iter(a,b,x,xold);
        if (k==5*((int)(k/5)) ) {
          printf("%2d :",k);
          for (i=0;i<ma;i++) printf(" %9.6f",x[i]);
        }
      }
    for (i=0;i<ma;i++) printf(" %12.9f",x[i]);
    s=residual(a,x,b);
    printf("\nResidual = %12.4e \n",s);
    printf("Enter 0 if iterate again: \n");
    scanf("%ld",&new1);
    } while (new1==0) ;
    return 0;
}
/* FILE: myjgsit.cpp                                          */
```

Ohjelman tulostusta:

```
Matrix a =

6x6 matrix:
  31.00000    7.00000    7.00000   -5.00000   -7.00000    2.00000
   3.00000   23.00000    6.00000    2.00000   -7.00000    2.00000
  -6.00000    7.00000   26.00000    5.00000   -0.00000    5.00000
   7.00000   -0.00000    2.00000   18.00000   -0.00000   -6.00000
   7.00000   -5.00000    6.00000    3.00000   32.00000   -8.00000
  -7.00000    4.00000    8.00000   10.00000    8.00000   40.00000
Enter iteration: (1) Jacobi, (2) Gauss-Seidel

 ***
 ikind = 1
      x[0]      x[1]      x[2]      x[3]      x[4]      x[5]

 1 :  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
```

```
 5 :  2.902777  2.006929  1.073602 -0.089565 -1.001327 -1.879540 6.9473e+00
10 :  3.007191  2.004650  1.009034 -0.026923 -1.011529 -1.981269 1.0736e+00
15 :  3.002872  2.000989  1.000257 -0.003249 -1.001706 -1.998851 1.5405e-01
20 :  3.000374  2.000122  0.999908 -0.000143 -1.000112 -2.000079 1.6855e-02
25 :  3.000020  2.000006  0.999981  0.000023 -0.999994 -2.000029 1.5958e-03
30 :  2.999998  1.999999  0.999998  0.000006 -0.999997 -2.000004 2.2342e-04
35 :  2.999999  2.000000  1.000000  0.000001 -1.000000 -2.000000 3.1502e-05
40 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 3.3040e-06
  2.999999927  1.999999977  1.000000021  0.000000020 -0.999999981 -1.999999978
Residual =   3.3040e-06
Enter 0 if iterate again:
Enter iteration: (1) Jacobi, (2) Gauss-Seidel

 ***
 ikind = 1
      x[0]       x[1]       x[2]       x[3]       x[4]       x[5]

 1 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000
 5 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 3.2154e-07
10 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 4.6960e-08
15 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 6.3876e-09
20 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 6.4617e-10
25 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 6.5531e-11
30 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 9.8543e-12
35 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 1.2763e-12
40 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 1.2297e-13
  3.000000000  2.000000000  1.000000000  0.000000000 -1.000000000 -2.000000000
Residual =   1.2297e-13
Enter 0 if iterate again:
Enter iteration: (1) Jacobi, (2) Gauss-Seidel

 ***
 ikind = 2
      x[0]       x[1]       x[2]       x[3]       x[4]       x[5]

 1 :  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000  0.000000
 5 :  2.974984  2.025822  0.990099  0.024431 -0.980725 -2.014942 1.1610e+00
10 :  2.997034  2.000487  0.999925  0.002184 -0.998699 -2.001359 1.2265e-01
15 :  3.000071  2.000014  0.999995 -0.000068 -1.000036 -1.999964 3.4590e-03
20 :  3.000007  2.000001  1.000000 -0.000007 -1.000004 -1.999996 3.4302e-04
25 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 1.0556e-05
30 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 1.0347e-06
35 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 3.1755e-08
40 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 3.1126e-09
  3.000000000  2.000000000  1.000000000 -0.000000000 -1.000000000 -2.000000000
```

```
Residual =   3.1126e-09
Enter 0 if iterate again:
Enter iteration: (1) Jacobi, (2) Gauss-Seidel

 ***
 ikind = 2
      x[0]      x[1]      x[2]      x[3]      x[4]      x[5]

 1 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000
 5 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 9.5513e-11
10 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 9.3610e-12
15 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 2.9735e-13
20 :  3.000000  2.000000  1.000000 -0.000000 -1.000000 -2.000000 3.3751e-14
(....)
40 :  3.000000  2.000000  1.000000  0.000000 -1.000000 -2.000000 0.0000e+00
  3.000000000  2.000000000  1.000000000  0.000000000 -1.000000000 -2.000000000
Residual =   0.0000e+00
Enter 0 if iterate again:
```

1.36. Permutaatiomatriisit. Kertomalla $n \times n$ matriisi vasemmalta voidaan vaihtaa matriisin rivit ja kertomalla oikealta sarakkeet. www-sivulla on tähän liittyvä esimerkkiohjelma `mymatope.cpp`.

1.37. Kurssilla käytettävä hakemistorakenne.

```
nrc02
    |- answers
    |- data (dates1.dat)
    |- drivers (xairy.cpp)
    |- lib (libnr.a)
    |- responses (sfroid.resp,...)
    |- sources (addint.cpp,.. NR ohjelmat)
    |- utils (mybugs.h, nr.h, nrutil.h, ...)
    |- gnuplot02 (gnuplot-ohjelmia)
    |- democpp02 (luentojen demo-ohjelmia, esim. myutl4.cpp )
    |- wrk (tyohakemisto)
    |
    |- harj
    |     |- h00
    |     |- h01
    |     |  ..
    |     |- h10
```

1.38. Aputiedosto beg.cpp. Kohdassa 1.1 mainittua aputiedostoa beg.cpp voimme mukauttaa joustavaan käyttöön kurssillamme tekemällä siihen erilaisia täydennyksiä, ks. alla.

```
/* FILE: beg.cpp begins.                                    */
/*  g++ -Wall beg.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr  */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"

int main()
{
  Mat_DP a(4,4),ai(4,4),b(4,4),u(4,4);
  ranmat2(a,-1,1);
  invmat(a,ai);
  unitmat(u);
  matmul(a,ai,b);  /* Also b=a*ai;   */
  a=b-u;  // a= a*inv(a)-Id
  cout <<"a*inv(a)-Id = \n"<<a<<endl;
  cout<<"norm2(a*inv(a)-Id) = "<<mnormp(a,2)<<endl;
}
/* FILE: beg.cpp ends.                                      */
```

1.39. NR:n esimerkkiohjelmat. Seuraavasta istuntolokista ilmenee toisaalta mitä vaikeuksia voi tulla vastaan kun kokeilee ohjelmien toimintaa ja toisaalta miten vaikeudet voitetaan. Tässä on katsottu pelkästään ohjelmaa ludcmp, mutta muiden ohjelmien käyttö on täysin analogista.

```
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk pwd
/home/vuorinen/nrcpp02/wrk
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk find ../. -name *.cpp | xargs grep ludcmp
```

```
.././drivers/xcyclic.cpp:        NR::ludcmp(aa,indx,d);
.././drivers/xlubksb.cpp:          NR::ludcmp(c,indx,p);
.././drivers/xludcmp.cpp:// Driver for routine ludcmp
.././drivers/xludcmp.cpp:          NR::ludcmp(a,indx,d);
.././drivers/xmprove.cpp:        NR::ludcmp(aa,indx,d);
.././sources/fred2.cpp: ludcmp(omk,indx,d);
.././sources/fredex.cpp:        NR::ludcmp(a,indx,d);
.././sources/ludcmp.cpp:void NR::ludcmp(Mat_IO_DP &a, Vec_O_INT &indx, DP &d)
.././sources/ludcmp.cpp:
                if (big == 0.0) nrerror("Singular matrix in routine ludcmp");
```

```
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk cp ../drivers/xludcmp* .
../drivers/xludcmp.cpp -> ./xludcmp.cpp
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk g++ xludcmp.cpp -o a -lm
xludcmp.cpp:5: nr.h: No such file or directory
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk g++ xludcmp.cpp -o a -lm -lnr
xludcmp.cpp:5: nr.h: No such file or directory
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk g++ xludcmp.cpp -I../util -o a -lm -lnr
xludcmp.cpp:5: nr.h: No such file or directory
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk g++ xludcmp.cpp -I../utils -o a -lm -lnr
/usr/bin/ld: cannot find -lnr
collect2: ld returned 1 exit status
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk g++ xludcmp.cpp -I../utils
-I../lib -o a -lm -lnr
/usr/bin/ld: cannot find -lnr
collect2: ld returned 1 exit status
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk ls ../lib
libnr.a
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk g++ xludcmp.cpp -I../utils
-L../lib -o a -lm -lnr

[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk a
bash: a: command not found
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk ./a
Numerical Recipes run-time error...
Data file matrx1.dat not found
...now exiting to system...
```

```
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk find ../. -name  matrx1.dat
.././drivers/matrx1.dat
```

```
.././data/matrx1.dat

[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk cp ../data/mat* .
../data/matrx1.dat -> ./matrx1.dat
../data/matrx2.dat -> ./matrx2.dat
../data/matrx3.dat -> ./matrx3.dat


[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk ls
#a.jnk#  a.jnk       badmtx.cpp~  matrx1.dat  matrx3.dat
a        badmtx.cpp  beg.cpp      matrx2.dat  xludcmp.cpp

[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/wrk ./a
original matrix:
           1           0           0
           0           2           0
           0           0           3

product of lower and upper matrices (rows unscrambled):
           1           0           0
           0           2           0
           0           0           3
(........)
```

2 LINEAARISET YHTÄLÖRYHMÄT

2.1. Lineaariset yhtälöryhmät ja laskennallinen tiede. Lineaarisia yhtälöryhmiä esiintyy useissa tekniikan ja luonnontieteiden sovelluksissa sekä monenlaisissa tilastollisissa tarkasteluissa yhteiskuntatieteiden ja kaupallisten tieteiden alueella. Laskennallisen tieteen piirissä numeeriset tehtävät sisältävät tavallisesti osanaan lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisun. Yhtälöryhmiin johdutaan matemaattisen mallintamisen kautta. Mallia sopivasti yksinkertaistamalla pyritään tavallisesti siihen, että alkuperäinen mahdollisesti epälineaarinen tehtävä voitaisiin palauttaa lineaariseksi eli linearisoida. Esimerkiksi osittaisdifferentiaaliyhtälöiden numeerisen ratkaisun keskeisenä osana on laajojen lineaaristen yhtälöryhmien ratkaisu. Mikäli yhtälöryhmä on niin suuri, että kerroinmatriisin muistitilan tarve tai laskennan vaatima aika muodostuvat ongelmaksi, pyritään hyödyntämään kerroinmatriisin rakennetta tallettamalla vain nollasta eroavat alkiot. Matriisin mahdollista symmetriaa voidaan myös käyttää samaan tapaan muistiresurssien säästämiseksi.

Lineaarisen yhtälöryhmän yleinen muoto on

$$(1) \qquad \begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \qquad\vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n = b_m \end{cases}$$

tai matriisien avulla lausuttuna

$$(2) \quad AX = B, \quad A = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \quad B = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}$$

Lineaarialgebra antaa täydellisen vastauksen kysymykseen matriisiyhtälön (2) ratkaisun olemassaolosta ja yksikäsitteisyydestä. Jos $M < N$ ei ratkaisu yleensä ole yksikäsitteinen. Jos $M > N$

ei ratkaisua yleensä ole olemassa lineaarialgebran mielessä, mutta voidaan etsiä ratkaisua pienimmän neliösumman (pns) mielessä. Tapauksessa $M = N$ yhtälöryhmällä (2) on yksikäsitteinen ratkaisu jos ja vain jos on olemassa käänteismatriisi A^{-1}.

Matriisin esitystä tietokoneessa tarkasteltiin jo edellisen luvun lopussa. Lähtökohtana on "looginen koko" $M \times N$. Tarvitaan "fyysinen kaavio"(osa tietokoneen muistia), jonka koko on $MP \times NP$ "muistiyksikköä"(yksikön koko riippuu mm. tietotyypistä: `int`, `long int`, `float`, `double` jne.) ja (tavallisesti) $MP \geq M$, $NP \geq N$. Poikkeuksia voi esiintyä, jos matriiseissa tiedetään jotkin rivit nolliksi tai myös, jos nollasta eroavia alkioita on vähän, jolloin matriisia ei talleteta kokonaan, vaan ainoastaan nollasta eroavat alkiot. Jatkossa oletamme, että matriisin alkiot ovat reaalilukuja. Matriisia, jossa nollasta eroavia alkioita on vähän sanotaan *harvaksi* (engl. sparse). Sen vastakohta on *täysi* (engl. full) matriisi, jonka kaikki alkiot talletetaan. Harvojen matriisien käsittelyyn on kehitetty algoritmeja, jotka voivat olla merkittävästi tehokkaampia kuin vastaavien täysien matriisien algoritmit.

Matriisiyhtälön (2) ratkaisemisen yhteydessä tarkastelemme seuraavia ongelmia:

(a) $Ax = b_j,\ j = 1, ..., p$ (monta b_j:tä, A sama).

(b) $M = N$: Etsi A^{-1}, $\det A$.

(c) Singulaariarvohajotelma (singular value decomposition, SVD)

(d) $M > N$: (2):n pns-ratk. *normaaliyhtälöt.*

2.2. Ratkaisun vaativuus. Jos $m = n$, niin täyden matriisin tapauksessa yhtälöryhmän (1) ratkaisulle tällä kurssilla esitettävät algoritmit ovat vaativuudeltaan (vaativuus ja kompleksisuus ovat synonyymejä) suuruusluokkaa n^3, kun taas tridiagonaalimatriisin tapauksessa vaativuusluokka on n. Edellä potenssi 3 ei ole paras mahdollinen: tehokkaammassa ns. Strassenin algoritmissa potenssi

on $\log_2 7 \approx 2.807$. Kysymys tarkasta alarajasta yhtälöryhmän (1) vaativuudelle on avoin.

Numeerinen lineaarialgebra on numeerisen analyysin tärkeimpiä osa-aloja sovellusten kannalta. Valtaosa tieteellisen laskennan menetelmistä käyttää osanaan numeerista lineaarialgebraa. Numeerisen lineaarialgebran algoritmien tehokkuus on näinollen tieteellisen laskennan pullonkauloja. Massiivisessa numeerisessa laskennassa yhtälöryhmät voivat sisältää esim. 500 000 muuttujaa. Näin laajojen lineaaristen yhtälöryhmien ratkaisu nykyisin tietokonein vaatii "täsmälaskentaa", joka huomioi yhtälöryhmän rakenteen (symmetria, lohkorakenne) ja erityisesti sen, onko matriisi harva.

Lineaarialgebran perusoperaatiot on koottu ns. `LINPACK` pakettiin. Luettelo numeerisen matematiikan public domain C-ohjelmista on saatavana tiedostona osoitteesta:

`ftp://usc.edu/pub/C-numanal/numcomp-free-c.gz` .

$n \times n$ matriisien kertolaskun vaativuutta verrattiin kokeellisesti potenssiin n^3. Saatiin seuraavia tuloksia (ohjelma `mycxty.cpp`).

```
Time complexity T(n) of n*n matrix multiplication
        n       T(n) (ms)     n^3
        10        0.00         1000
        20        1.00         8000
        30        5.00        27000
        40       12.00        64000
        50       22.00       125000
```

Voidaan osoittaa, että vaativuudeltaan $n \times n$ matriisin kääntäminen on samaa luokkaa kuin $n \times n$ matriisien tulo.

2.3. Esimerkkejä säännöllisistä matriiseista. Palautamme mieleen lineaarialgebrasta, että yhtälöryhmällä (1) on tapauksessa $m = n$ yksikäsitteinen ratkaisu täsmälleen silloin kun matriisi on säännöllinen, ts. $det(A) \neq 0$. Mitään erityisen kätevää ehtoa säännöllisyydelle ei tunneta. Muutamissa erikoistapauksissa ratkeavuus, eli A^{-1}:n olemassaolo, on selvää tai ainakin tunnettua:

• jos A on diagonaalimatriisi, jonka diagonaalialkiot ovat nollasta eroavia lukuja d_{ii}, niin A^{-1} on myös diagonaalimatriisi ja diagonaalialkiot ovat $1/d_{ii}$,

- jos A on riveittäin diagonaalipainotteinen
- jos A on ylä- tai alakolmiomatriisi ja diagonaalialkiot $\neq 0$
- jos A on positiividefiniitti

2.4. Gaussin-Jordanin eliminointi. Menetelmä soveltuu yhtälöryhmän $Ax = b_j,\ j = 1, .., p$, ratkaisemiseen.

Hyviä puolia:
- stabiili, jos käytetään täydellistä pivotointia (ks. alla),
- tuottaa myös A^{-1}:n,
- menetelmän tehokkuus paranee p:n mukana.

Huono puoli:
- ei sovellu jos käänteismatriisia A^{-1} ei ole.

Yleensä jatkossa esitettävä LU-menetelmä on parempi.

Olkoon $A = (a_{ij}),\ Y = (y_{ij})\ N \times N$ matriisi $x_j = (x_{j1}, ..., x_{jN})^T$ sekä $\mathbf{1}\ N \times N$ yksikkömatriisi. Samanaikaiset yhtälöryhmät

$$(I) \qquad A \cdot x_j = b_j,\ A \cdot Y = \mathbf{1},\ j = 1, 2, 3$$

merkitään lyhyemmin

$$(II) \qquad A \cdot [x_1\ x_2\ x_3\ Y] = [b_1\ b_2\ b_3\ \mathbf{1}]$$

Perusominaisuuksia (I):lle:

(a) Jos vaihdetaan A:n ja b:n (II:n) kaksi vaakariviä, niin $x_j(Y)$ ei muutu.

(b) Ratkaisu $x_j(Y)$ ei muutu jos A:n ja b_j:n (II:n) jokin vaakarivi korvataan vaakarivien lineaarikombinaatiolla.

(c) Sarakkeitten vaihto A:ssa antaa saman ratkaisun vain jos vastaavat x_j:t ja Y:n vastaavat rivit vaihdetaan.

Gaussin-Jordanin algoritmi (I):n ratkaisemiseksi, olettaen että esiintyvät jakajat ovat nollasta poikkeavia, on seuraava:

Muodostetaan (I):stä uusi yhtälöryhmä s.e.

- 1. rivi jaetaan a_{11}:llä
- rivistä j, $j \neq 1$, vähennetään alkuperäinen 1. rivi vakiolla a_{j1}/a_{11} kerrottuna jolloin saadaan uusi yhtälöryhmä (1)', jonka 1. sarakkeen kertoimet ovat δ_{j1}

Muodostetaan (I)':sta uusi yhtälöryhmä s.e.

- 2. rivi jaetaan a'_{22}:lla
- j. rivistä, $j \neq 2$, vähennetään (1)':n 2. rivi vakiolla a'_{j2}/a'_{22} kerrottuna jolloin saadaan uusi yhtälöryhmä $(I)''$, jonka 2. sarakkeen kertoimet ovat δ_{j2}.

Toistetaan N kertaa $\Rightarrow$ saadaan $x = Ix = b'$.

Pivotointi. Numeerisen tarkkuuden parantamiseksi on todettu tarpeelliseksi käyttää pivotointia (tuentaa) ts. rivien ja mahdollisesti lisäksi sarakkeiden vaihtoa s.e. "jakajaksi" kussakin vaiheessa tulee jokin erityisen toivottava luku (joka tapauksessa $\neq 0$). Esimerkiksi jos vaiheessa p matriisin kertoimet ovat $(a_{ij}^{(p)})$, niin voidaan valita tukialkioksi suurin luvuista $|a_{ij}^{(p)}|$, $i \geq p$ tai $j \geq p$. Toinen mahdollinen valinta on *implisiittinen tuenta*, jossa ennen eliminoinnin aloittamista kukin yhtälö erikseen kerrotaan puolittain sellaisella luvulla, että ko. rivin itseisarvoltaan suurimmaksi kertoimeksi tulee 1.

Ks. algm `NR::gaussj`, s. 39, Example book, s. 6.

2.5. Gaussin eliminointi takaisinsijoituksella. Muuten sama kuin Gaussin-Jordanin algoritmi, mutta vaiheessa j vähentäminen kohdistuu pelkästään yhtälöihin $k > j$. Lopputilanteessa yhtälöryhmä on saatettu muotoon, jossa matriisin kaikki diagonaalin alapuoleiset alkiot ovat nollia:

$$\begin{bmatrix} a'_{11} & a'_{12} & \cdots & a'_{1n} \\ 0 & a'_{22} & \cdots & a'_{2n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \\ 0 & 0 & \cdots & a'_{nn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b'_1 \\ b'_2 \\ \vdots \\ b'_n \end{bmatrix}$$

Tätä tyyppiä oleva matriisi voidaan helposti kääntää aloittamalla alariviltä kuten jo aiemmin nähtiin. Viimeisestä yhtälöstä saadaan $x_n = b'_n/a'_{nn}$. Viimeistä edellisestä ratkaistaan x_{n-1} jne. Menettely, joka antaa luvut $x_n, x_{n-1}, ..., x_1$ on nimeltään *takaisinsijoitus* (engl. backsubstitution).

Gaussin algoritmia koskeva kirjallisuus on erittäin laaja ja algoritmin eri versioita kehitetään edelleen. Siitä on kehitetty mm. lohkomuotoisille matriiseille sopivia versioita ja tutkittu rinnakkaislaskennan näkökulmasta.

2.6. LU-hajoitelma. Oletetaan, että neliömatriisi A voidaan kirjoittaa muotoon

$$A = L \cdot U,$$

missä L on *alakolmiomatriisi* (diagonaalin yläpuoliset alkiot ovat nollia) ja U on *yläkolmiomatriisi* (diagonaalin alapuoliset alkiot ovat nollia) ja kaikki diagonaalialkiot nollasta eroavia. Yo. tyyppiä olevien matriisien L ja U kääntäminen on helppoa kuten jo Gaussin eliminoinnin yhteydessä totesimme.

Lineaarinen yhtälöryhmä $Ax = b$ voidaan kirjoittaa muotoon

$$Ax = (L \cdot U)x = L(Ux) = b. \tag{1}$$

Ratkaisu tehdään kahdessa vaiheessa niin, että ensin etsitään y s.e.

$$Ly = b, \quad L = (\alpha_{ij}\Theta_{ij}),\ \Theta_{ij} = \begin{cases} 0 & j > i \\ 1 & i \geq j \end{cases} \tag{2}$$

ja tämän jälkeen etsitään x s.e.

$$U \cdot x = y, \quad U = (\beta_{ij}\Theta_{ij}). \tag{3}$$

Nyt siis (1) on hajoitettu kahdeksi yhtälöryhmäksi (2), (3).

Saavutettu etu: Ylä- ja aladiagonaalisten yhtälöryhmien (2), (3) ratkaisu on helppoa (Gaussin eliminointi takaisinsijoituksella).

2.7. LU-hajoitelman muodostaminen. Matriisitulon kaavasta saadaan

$$(LU)_{ij} = \sum_{k=1}^{n} (L)_{ik}(U)_{kj} = \sum_{k=1}^{n} \alpha_{ik}\Theta_{ik}\beta_{kj}\Theta_{jk}$$

$$(4) \qquad (LU)_{ij} = \begin{cases} (i<j): \ \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{ij} = a_{ij} \\ (i=j): \ \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ii}\beta_{jj} = a_{ij} \\ (i>j): \ \alpha_{i1}\beta_{1j} + \alpha_{i2}\beta_{2j} + \cdots + \alpha_{ij}\beta_{jj} = a_{ij} \end{cases}$$

Yhtälöryhmässä (4) on N^2 yhtälöä, N^2+N tuntematonta α_{ij}, β_{ij}.

Näistä voidaan siis N kpl kiinnittää mielivaltaisesti ja ratkaista muut. Seuraavassa algoritmissa kiinnitetään diagonaalialkiot

$$(5) \qquad \alpha_{ii} = 1 \ \forall i = 1, ..., N.$$

Croutin algoritmi. Algm antaa luvut α, β seuraavasti:

a) Asetetaan $\alpha_{11} = 1$ ja $\beta_{11} = a_{11}$

b) Jokaisella $j = 2, 3, ..., N$ tehdään seuraavat 2 operaatiota. Kun $i = 1, .., j$ ratkaistaan (4) & (5):n nojalla

$$\beta_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} \alpha_{ik}\beta_{kj} \ (i \leq j)$$

ja kun $i = j+1, ..., N$ ratkaistaan (4):n nojalla

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\beta_{jj}}(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} \alpha_{ik}\beta_{kj}) \ (i > j).$$

Croutin algoritmi generoi siis matriisin

$$\begin{bmatrix} \beta_{11} & \cdots & \beta_{1n} \\ \alpha_{21} & \cdots & \beta_{2n} \\ \vdots & & \vdots \\ \alpha_{N1} & \cdots & \beta_{NN} \end{bmatrix}$$

sarakkeittain vasemmalta oikealle ja kunkin sarakkeen ylhäältä alas.

Croutin algoritmin yhteydessä tuenta on olennaista, ts. ylläolevaa algoritmia on vielä tältä osin täydennettävä. Osittainen tuenta (rivien vaihto) on kirjan algoritmissa `NR::ludcmp` (s. 46) todettu riittäväksi.

Olemassaolo. LU-hajoitelmaa ei ole olemassa kaikille säännöllisille neliömatriiseille. Kuitenkin säännölliselle matriisille on olemassa sellainen permutaatiomatriisi P, että PA:lla on LU-hajoitelma.

Kun LU-hajoitelma on tehty ohjelman `NR::ludcmp` avulla, voidaan yhtälöryhmän ratkaisu toteuttaa algoritmilla `NR::lubksb` (s. 47).

Matriisin kääntäminen LU-hajoitelmalla. LU-hajoitelman avulla matriisin kääntäminen palautuu ylä- ja aladiagonaalisten matriisien kääntämiseksi ja on siis helppoa (Gauss takaisinsijoituksella). Olkoon A annettu $n \times n$ matriisi ja Y yksikkömatriisi, j:s sarake y_j. Kullakin j ratkaistaan $LUx = y_j$ `NR::lubksb`:n avulla, jolloin saadaan x_j. Nyt $A^{-1} = [x_1, ..., x_n]$. Kurssin matriisipaketissa `matutl02.cpp` matriisinkääntö tehtiin `NR::gaussj`:n avulla.

2.8. Matriisin determinantti. LU-hajoitelmana annetun matriisin determinantti voidaan ilmaista tulona $\beta_{11}..\beta_{NN}$.

Jos käytetään (kuten kirjan ohjelmissa) tuentaa niin rivien järjestys on ehkä muuttunut ja siis myös determinantin merkki on voinut muuttua – näin käy, jos vaihtojen lukumäärä on pariton. Determinantti saadaan seuraavasti:

```
DP t;
NR::ludcmp(aa,indx, t);  /* Returns t = +1 or -1 */
for (int j=0;j<n;j++){ t = t*aa[j][j];}
return t;
```

2.9. Tridiagonaalinen yhtälöryhmä. Sanotaan, että matriisi on tridiagonaalinen, jos sen nollasta eroavat alkiot ovat a_{ij}, $|i - j| \leq 1$. Tällainen matriisi on tärkeä esimerkki harvasta matriisista. Koska

harvojen matriisien alkioista suurin osa on nollia, on tarkoituksenmukaista käyttää hyväksi tätä tietoa matriisikertolaskussa ja muissa matriisialgebran operaatioissa sekä myös siten että talletetaan vain nollasta eroavat alkiot.

Algoritmi `NR::tridag` (s. 51) ratkaisee tridiagonaalisen yhtälöryhmän em. näkökohdat huomioiden.

2.10. Jälki-iterointi. Oletetaan, että $Ax = b$, ja tunnetaan $x + \delta x$ (δx =virhe), jolloin

$$A(x + \delta x) = b + \delta b \Rightarrow \ A \cdot \delta x = \delta b = A(x + \delta x) - b.$$

Likiarvon parantamiseksi tästä voidaan ratkaista δx. Saadaan $x = x + \delta x - \delta x$. Algoritmi `NR::mprove` (s. 56) käyttää tätä ideaa.

2.11. Singulaariarvohajoitelma (SVD). Esittelemme nyt, ilman todistuksia kuten tavallista, erään matriisihajoitelman, jonka avulla saadaan monipuolista tietoa matriisin numeerisista ominaisuuksista. Tämä matriisihajoitelma, SVD, on tietokoneiden yleistyessä noussut keskeiseen asemaan numeerisessa lineaarialgebrassa, mutta sitä ei välttämättä esitetä lineaarialgebran peruskurssilla.

Aluksi palautamme mieleen että $m \times n$ matriisin $A = (a_{ij})$ *transpoosi* A^T on $n \times m$ matriisi $(A^T)_{ij} = a_{ji}$. $m \times n$ matriisi on *sarakkeittain ortogonaalinen,* jos sen sarakkeet ovat ortogonaalisia. Neliömatriisi B on *ortogonaalinen,* jos se on säännöllinen (ts. $\det(B) \neq 0$) ja $B^T = B^{-1}$. Seuraavan tärkeän lauseen todistus löytyy pidemmälle menevistä numeriikan oppikirjoista, esim. Stoer-Bulirsch, s. 332-334, Lause 6.4.10 tai Golub-Van Loan, s. 71, Lause 2.5.1.

2.12. Lause (SVD). Reaaliselle $m \times n, m \geq n$, matriisille A on olemassa sarakkeittain ortogonaalinen $m \times n$ matriisi U ja ortogonaalinen $n \times n$ matriisi V s.e.

$$A = UWV^T,$$

missä W on $n \times n$ diagonaalimatriisi. Jos $W = \mathrm{diag}(w_1, \ldots, w_n)$, niin $w_1 \geq w_2 \geq \ldots \geq w_n \geq 0$.

Lause 2.12 vastannee suunnilleen algm:n `NR::svdcmp` sisältöä– valitettavasti tekijät eivät ole täsmällisesti ilmaisseet mitä ko. algm tekee. Matemaattisessa kirjallisuudessa tulos formuloidaan joskus hieman toisin: U ja V ovat $m \times m$ ja $n \times n$ ortogonaalimatriiseja ja W $m \times n$ diagonaalimatriisi, lisäksi ehto $m \geq n$ on epäoleellinen. Ohjelma `NR::svdcmp` (versio 2.08) tuottaa yo. tyyppiä olevan hajoitelman, mutta siinä singulaariarvot eivät ole kasvavassa järjestyksessä.

Diagonaalimatriisi W:n alkiot ovat A:n *singulaariarvoja*. Siinä tapauksessa, että A on $n \times n$ neliömatriisi ja kaikki singulaariarvot ovat nollaa suurempia määritellään A:n *kuntoisuusluku* lausekkeella

$$\mathrm{cond}(A) = wmax/wmin,$$

missä $wmax$ ja $wmin$ ovat vastaavasti suurin ja pienin singulaariarvo.

Tapauksessa $\det(A) \neq 0$ on $\mathrm{cond}(A)$ kvantitatiivinen mitta sille, "kuinka paha" A on numeerisilta ominaisuuksiltaan tai kuinka lähellä A on singulaarista matriisia. (Välihuomautus: $|\det(A)|$ ei ole sopiva mitta tähän tarkoitukseen, sillä A ja λA ovat numeerisilta ominaisuuksiltaan samanveroisia kun taas $\det(\lambda A) = \lambda^n \det(A)$, jos A on $n \times n$ matriisi ja $\lambda \in R$.) Edellisessä luvussa esittelimme jo menettelyn sille, miten `cond(A)` voidaan laskea kirjan algoritmin `svdcmp` avulla. $n \times n$ yhtälöryhmän ratkaisu voidaan tehdä käyttäen algoritmeja `NR::svdcmp` ja `NR::svbksb`. Jos $m > n$ saadaan ratkaisu pienimmän neliösumman mielessä.

2.13. Pseudoinverssi. Reaaliluvun $\sigma \neq 0$ pseudoinverssi on $1/\sigma$ ja 0:n pseudoinverssi on 0. Diagonaalimatriisin W pseudoinverssi W^+ (l. valekäänteismatriisi) saadaan transponoimalla matriisi ja korvaamalla diagonaalialkiot pseudoinversseillään. Yleisen $m \times n, m \geq n$, matriisin A, jolla on singulaariarvohajoitelma UWV^T, pseudoinverssi on $n \times m$ matriisi $A^+ = VW^+U^T$. Siinä tapauksessa, että A on ei-singulaarinen neliömatriisi sen pseudoinverssi on sama kuin A^{-1}. Kaikissa tapauksissa yhtälöryhmän $Ax = b$ PNS-ratkaisu saadaan kaavasta $x = A^+b$.

Pseudoinverssi em. ideoiden mukaisesti tapauksessa $m \geq n$ on implementoitu pakettiin `solve.cpp`, joka esitellään alempana.

Pseudoinverssi on olemassa myös tapauksessa $m < n$, mutta em. ideaan pohjautuva implementointi ei näytä onnistuvan. Sekä NR että GSL eivät kumpikaan sano juuri mitään tästä tapauksesta. Onnistumiskriteerinä voi pitää allamainittuja Mooren-Penrosen ehtoja (a)-(d), jotka karakterisoivat pseudoinverssin.

Tapauksen $m < n$ selvittämiseksi palaamme ensin tapaukseen $m > n$. Oletamme, että $m > n$ ja A:n sarakeasteluku on n ts. että A:n sarakevektorit muodostavat lin.riippumattoman joukon. Silloin voidaan helposti osoittaa, että $A^T A$ on positiivisesti definiitti ja siis kääntyvä. Yht.ryhmä $Ax = b$ voidaan siis kirjoittaa $A^T Ax = A^T b$ ja ratkaista kaavalla

$$x = (A^T A)^{-1} A^T b, \tag{2.13a}$$

josta päätellään, että $A^+ \equiv (A^T A)^{-1} A^T$. Siinä tapauksessa, että $m < n$ menetellään vastaavasti, olettaen, että A:n riviasteluku on m (jolloin A^T:n sarakeasteluku on m). Soveltaen edelläolevaa A^T:hen, todetaan, että on olemassa $((A^T)^T A^T)^{-1} = (AA^T)^{-1}$, joten $Ax = b$ voidaan kirjoittaa muotoon

$$Ax = (AA^T)(AA^T)^{-1} b$$

josta

$$x = A^+ b; \quad A^+ \equiv A^T (AA^T)^{-1} b. \tag{2.13b}$$

Yhdistäen ylläolevat kaavat todetaan, että jokaiselle $m \times n$ matriisille A, jonka asteluku (pienempi riviasteluvusta ja sarakeasteluvusta) on $\min\{m, n\}$, voidaan pseudoinverssi konstruoida kaavoilla (2.13a) ja (2.13b).

Tiedoston `solve.cpp` osana oleva `pseudoinv` tuottaa $m \times n$ matriisin pseudoinverssin sekä tapauksissa $m \geq n$ että $m \leq n$. Algm:n `pseudoinv` toimintaa ja Moore-Penrosen yhtälöiden pätemistä matriisiparille A, A^+ testataan ohjelmalla `mypseudo.cpp`, joka on www-sivulla.

2.14. Moore-Penrosen ehdot. Voidaan osoittaa, että matriisi A^+ on A:n pseudoinverssi jos ja vain jos se toteuttaa seuraavat ehdot:

$$\begin{cases} (a) & AA^+A = A, \\ (b) & A^+AA^+ = A^+, \\ (c) & (AA^+)^T = AA^+, \\ (d) & A^+A)^T = A^+A. \end{cases}$$

2.15. Singulaariarvojen editointi. NR esittää seuraavan idean, *singulaariarvojen editoinnin*, käyttämistä $n \times n$ yhtälöryhmän ratkaisussa tapauksissa, joissa `cond(`A`)` on suuri. Ensin muodostetaan singulaariarvohajoitelma ja kiinnitetään jokin pieni luku, *editointikynnys*, TINY (esim. 10^{-6}). Huomataan, että

$$A^+ = V[diag(1/w_j)]U^T.$$

Seuraavaksi korvataan nollalla kaikki sellaiset singulaariarvot $w[i]$ jotka ovat pienempiä kuin $TINY * w_{max}$ missä w_{max} on suurin singulaariarvoista. Tämä NR:n idea kuulostaa paradoksaaliselta, mutta idealle ovat perusteena pseudoinverssin eräät ominaisuudet. Tämän jälkeen ratkaisu etenee kuten edellä algoritmien `svdcmp` ja `svbksb` avulla. Lukija voi halutessaan kokeellisesti varmistua idean hyödyllisyydestä esim. tapauksessa, jossa yhtälöryhmän matriisi on $n \times n$ Hilbertin matriisi alkioina $a_{i,j} = 1/(i + j - 1)$.

2.16. Esimerkki. Yhtälöryhmällä

$$\begin{pmatrix} 2.000x + 0.6667y &= 2.000; \\ 1.000x + 0.3333y &= 1.000 \end{pmatrix} \qquad \text{cond}(a) = 5.5556 \cdot 10^4$$

on 1–käsitteinen ratkaisu $x = 1.000$, $y = 0.000$. Sen sijaan yhtälöryhmällä

$$\begin{pmatrix} 2.000x + 0.6666y &= 2.000 \\ \frac{1}{2}(2.000x + 0.6666y) &= 1.000 \end{pmatrix}$$

on äärettömän monta ratkaisua

$$\begin{pmatrix} x &= 1.000 - 0.3333k \\ y &= k, \quad k \in R^1, \end{pmatrix} .$$

Huomaa, että cond(a) on suuri, ja siten tehtävä epästabiili.

2.17. Yhteenveto NR:n yhtälöryhmän ratkaisualgoritmeista. Yhtälöryhmän ratkaisussa ei yleensä tarvita käänteismatriisia. NR suosittaa LU-menetelmän käyttöä lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisussa. Allaoleva ohjelma `mysolve` ja siihen liittyvä paketti `solve.cpp` sisältävät yhteenvedon NR:n erilaisista ratkaisumenetelmistä (`GJsolve`, `LUsolve`, `SVDsolve`). Näistä `SVDsolve` sisältää singulaariarvojen editoinnin kiinteällä editointikynnyksellä. `SVDsolve2`:ssa editointikynnyksen voi antaa parametrina. Tulostuksesta ilmenee, että virhe on kaikissa tapauksissa noin luokkaa 10^{-14}.

```
/* FILE: mysolve3.cpp begins.                                  */
/*  g++ mysolve3.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr        */

#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include <ctime>

using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#include "solve.h"

void DoTest(int n)
{
  time_t time1, time2;
  int i,m;
  m=500;    /* 1000 nxn lin. equations are solved.
               difftime returns time in seconds, hence
               for T(n) the unit is millisecond, ms  */
  Mat_DP a(n,n), atmp(n,n);
  Vec_DP rhs(n),sol(n), err(4), tmp(n), d(4);
  ranmat2(a,-1.0,1.0);
  atmp=a;
  sol=1.0;
  matvecmul(a,sol,rhs);
  /* We build a system a*x = rhs with the
      exact solution x= 1. */
  time1=time(NULL);
  for (i=0;i<m; i++){ GJsolve(atmp,rhs,sol);}
  time2=time(NULL);
```

```
  for (int ii=0;ii<n;ii++)  tmp[ii]=sol[ii]-1;
  err[0]=vnormp(tmp,2.0);
  d[0]= difftime(time2,time1);
      atmp=a;
  time1=time(NULL);
  for (i=0;i<m; i++){ LUsolve(atmp,rhs,sol);}
  atmp=a;
  time2=time(NULL);
  for (int ii=0;ii<n;ii++)  tmp[ii]=sol[ii]-1;
  err[1]=vnormp(tmp,2.0);
  d[1]= difftime(time2,time1);
  atmp=a;
  time1=time(NULL);
  for (i=0;i<m; i++){ SVDsolve(atmp,rhs,sol);}
  time2=time(NULL);
  for (int ii=0;ii<n;ii++)  tmp[ii]=sol[ii]-1;
  err[2]=vnormp(tmp,2.0);
  d[2]= difftime(time2,time1);
  atmp=a;
  time1=time(NULL);
  for (i=0;i<m; i++){ QRsolve(atmp,rhs,sol);}
  time2=time(NULL);
  for (int ii=0;ii<n;ii++)  tmp[ii]=sol[ii]-1;
  err[3]=vnormp(tmp,2.0);
  d[3]= difftime(time2,time1);
  printf("%4d   %8.2lf     %8.2lf     %8.2lf  %8.2lf  %10d\n",
          n, d[0], d[1], d[2],d[3],n*n*n);
  printf("err=   %8.2e    %8.2e    %8.2e    %8.2e \n",
          err[0], err[1], err[2],err[3]);
}
int main(void)
{
  init_srand();
  printf("\nTime complexity of n*n linear system solution\n");
  printf("   n      GJsolve    LUsolve    SVDsolve   QRsolve (ms)   n^3\n");
  for (int j=1;j<7;j++){
    DoTest(j*10);
  }
  return 0;
}
/* FILE: mysolve3.cpp ends.                                    */


/*
```

```
Time complexity of n*n linear system solution
   n      GJsolve    LUsolve    SVDsolve   QRsolve (ms)   n^3
  10       0.00         0.00         2.00      0.00        1000
err=   3.42e-15    4.69e-15    4.62e-15    2.35e-15
  20       1.00         1.00         9.00      1.00        8000
err=   2.60e-14    2.53e-14    2.28e-14    3.88e-14
  30       5.00         1.00        29.00      2.00       27000
err=   5.12e-15    7.42e-14    1.07e-13    1.78e-14
  40      11.00         3.00        68.00      5.00       64000
err=   2.32e-14    1.73e-14    2.82e-14    3.37e-14
  50      22.00         6.00       130.00     10.00      125000
err=   1.14e-14    2.12e-14    3.54e-14    1.83e-14
  60      37.00        10.00       221.00     16.00      216000
err=   2.29e-14    3.43e-14    4.86e-14    6.74e-14

*/
/* FILE: solve.cpp begins.                    */
/* Last updated: 2002-01-18                   */
#include "matutl02.h"
#include "solve.h"

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;

void GJsolve(Mat_DP &a, Vec_DP &b, Vec_DP &x)
  /* If a is nxn and b is nx1 this
     returns the solution x of a*x=b */
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), mb=b.size(),mx=x.size() ;
  if ((ma!=na)||(ma!=mb)||(ma!=mx))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in QRsolve. "
         <<endl;
    abort();
     }
  int n=ma;
  Vec_INT indx(n);
  Mat_DP ac(n,n), sol(n,1);
  ac=a;
  for (int j=0;j<n;j++) sol[j][0]=b[j];
```

```
    NR::gaussj(ac,sol);
    for (int j=0;j<n;j++) x[j]=sol[j][0];
}

void LUsolve(Mat_DP &a, Vec_DP &b, Vec_DP &x)
  /* If a is nxn and b is nx1 this
     returns the solution x of a*x=b */

{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), mb=b.size(),mx=x.size() ;
  if ((ma!=na)||(ma!=mb)||(ma!=mx))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in QRsolve. "
         <<endl;
    abort();
     }
  int n=ma; DP p;
  Vec_INT indx(n);
  Mat_DP ac(n,n);
  Vec_DP sol(n);
  ac=a;
  sol=b;
  NR::ludcmp(ac,indx,p);
  NR::lubksb(ac,indx,sol);
  x=sol;
}

void QRsolve(Mat_DP &a, Vec_DP &b, Vec_DP &x)
  /* If a is nxn and b is nx1 this
     returns the solution x of a*x=b */

{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), mb=b.size(),mx=x.size() ;
  if ((ma!=na)||(ma!=mb)||(ma!=mx))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in QRsolve. "
         <<endl;
    abort();
     }
  Vec_DP c(ma), d(ma);
  Mat_DP ac(ma,ma);
  ac=a;
  bool sing;
  NR::qrdcmp(ac, c, d, sing);
  if (sing ==1) {cout<<"Singularity in qrdcmp"<<endl;
          abort();}
  x=b;
```

```
  NR::qrsolv(ac,c,d,x);

}

void SVDsolve(Mat_DP &a, Vec_DP &b, Vec_DP &x)
/*
   If a is mxn and b is mx1 this
   returns the LSQ-solution x of a*x=b
   Singular value w[i] is set = 0 if
   w[i]/max{w[k]}< 1e-6;
*/

{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), mb=b.size(),mx=x.size() ;
  if ((na!=mx)||(ma!=mb))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in SVDsolve. "
         <<endl;
    abort();
    }
  Vec_DP w(na), c(ma), xnum(na);
  Mat_DP u(ma,na),v(na,na);
  u=a;
  c=b;
  NR::svdcmp(u,w,v);
  // find maximum singular value
  DP wmax=0.0, wmin;
  for (int k=0;k<na;k++)
    if (w[k] > wmax) wmax=w[k];
  // define "small"
  wmin=wmax*(1.0e-6);
  // zero the "small" singular values
  for (int k=0;k<na;k++)
    if (w[k] < wmin) w[k]=0.0;
  NR::svbksb(u,w,v,c,xnum);
  x=xnum;
}

void SVDsolve2(Mat_DP &a, Vec_DP &b, Vec_DP &x,DP eps_edit)
/*
   If a is mxn and b is mx1 this
   returns the LSQ-solution x of a*x=b
   Singular value w[i] is set = 0 if
   w[i]/max{w[k]}< eps_edit;
*/
```

```
{

  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(), mb=b.size(),mx=x.size() ;
  if ((na!=mx)||(ma!=mb))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in SVDsolve. "
         <<endl;
    abort();
    }
  Vec_DP w(na), c(ma), xnum(na);
  Mat_DP u(ma,na),v(na,na);
  u=a;
  c=b;
  NR::svdcmp(u,w,v);
  // find maximum singular value
  DP wmax=0.0, wmin;
  for (int k=0;k<na;k++)
    if (w[k] > wmax) wmax=w[k];
  // define "small"
  wmin=wmax*(eps_edit);
  // zero the "small" singular values
  for (int k=0;k<na;k++)
    if (w[k] < wmin) w[k]=0.0;
  NR::svbksb(u,w,v,c,xnum);
  x=xnum;
}


void psinv(Mat_DP &a, Mat_DP &pia)
/* psinv is used by pseudoinv to
   form the pseudoinverse of a matrix
*/
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(),
      mb=pia.nrows(),nb=pia.ncols() ;
  if ((ma>na)||(mb!=na)||(nb!=ma))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in psinv2. "
         <<endl;
    abort();
    }
  Mat_DP a1(ma,ma),a2(ma,ma), aT(na,ma),a3(na,na),a4(na,na);
  transp(a,aT);
  a3=aT*a;
  void pseudoinv(Mat_DP& ,Mat_DP&);
  pseudoinv(a3,a4); /* psinv2 calls pseudoinv with m=n */
  pia=a4*aT;
```

```
}

void pseudoinv(Mat_DP &a, Mat_DP &pia)
/*
     If  a is mxn matrix, then pia
     will be nxm, the pseudoinverse of a.
*/
{
  int ma=a.nrows(), na=a.ncols(),
      mb=pia.nrows(),nb=pia.ncols() ;
  if ((na!=mb)||(ma!=nb))
    {cout<<"Matrix/vector dimension error in pseudoinv. "
         <<endl;
    abort();
    }
  if (ma<na) psinv(a,pia);
  else
    {
      Vec_DP w(na); //, c(ma), xnum(ma);
      Mat_DP u(ma,na),v(na,na),wi(na,na);
      u=a;
      wi=0.0;
      NR::svdcmp(u,w,v);
      for (int i=0;i<w.size();i++)
        wi[i][i]= w[i]*w[i]>1e-16? 1.0/w[i]: 0;
      Mat_DP uT(na,ma);
      transp(u,uT);
      Mat_DP tmp(na,ma);
      tmp=wi*uT;
      pia= v*tmp;
    }
}
/* FILE: solve.cpp ends.                                    */
```

Em. `QRsolve` on toteutettu NR algm:ien pohjalta– vastaava kotikutoinen algm on ohjelmassa `myhouse2.cpp`.

2.18. Residuaali ja kuntoisuusluku. Jos $\tilde{x}$ on yhtälöryhmän $Ax = b$ ratkaisun approksimaatio, niin tuntuu luonnolliselta ajatella, että jos *residuaali* $r = A\tilde{x} - b$ on pieni, niin myös $||x - \tilde{x}||$ olisi pieni. Usein näin onkin, mutta ei aina.

2.19. Lause. Seuraavat epäyhtälöt ovat voimassa, jos A^{-1} on ole-

massa:

$$||x - \tilde{x}|| \leq ||r||||A^{-1}||$$
$$\frac{||x - \tilde{x}||}{||x||} \leq ||A||||A^{-1}||\frac{||r||}{||b||},$$

kun $x \neq 0, b \neq 0$.

Tod. Koska A on ei-singulaarinen, yhtälöstä $r = b - A\tilde{x} = Ax - A\tilde{x}$ seuraa $x - \tilde{x} = A^{-1}r$ joten

$$||x - \tilde{x}|| = ||A^{-1}r|| \leq ||A^{-1}||||r||.$$

(Lineaarikuvaukselle B aina $||Bx|| \leq ||B||||x||$.) Toisaalta ehdosta $b = Ax$ saadaan $||b|| \leq ||A||||x||$ ja

$$\frac{||x - \tilde{x}||}{||x||} \leq \frac{||A||||A^{-1}||||r||}{||b||}.$$

Voidaan osoittaa, että $||A||||A^{-1}||$, jota yo. lauseen nojalla voitaisiin sanoa virheen vahvistumiskertoimeksi, on sama kuin aikaisemmin esitelty kuntoisuusluku cond(A).

2.20. Kuntoisuusluvun säätö. Testaustarkoituksia varten voi olla kätevää tuottaa matriiseja, joiden kuntoisuusluku on ennalta annettu. Tähän päästään seuraavasti:

(1) generoidaan satunnaismatriisin a SVD, $a = usv$,

(2) muutetaan singulaariarvoja s suotuisasti, tuloksena s_1,

(3) muokatulla matriisilla $b = us_1v$ on haluttu cond(b).

Nämä ideat on implementoitu ohjelmiin `rancon` ja `myrancon`, jotka löytyvät www-sivulta.

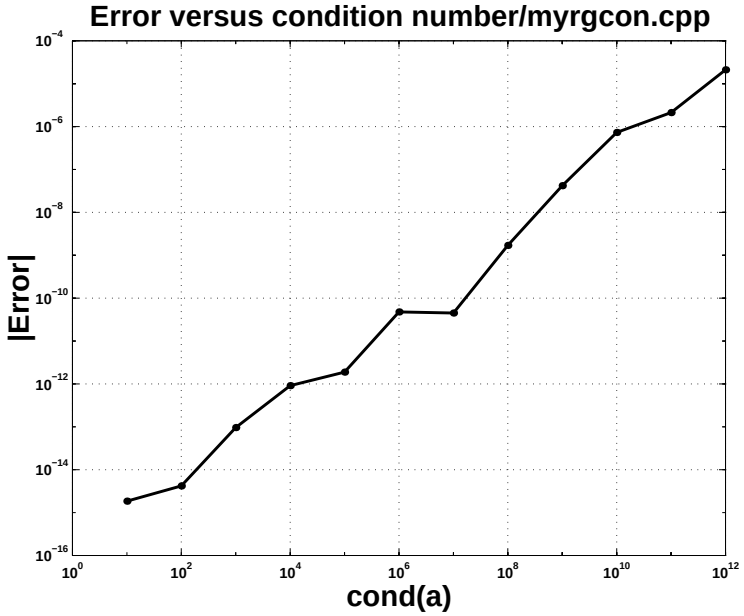
2.21. Kuntoisuusluvun vaikutus virheeseen. Lineaarisen yhtälöryhmän $Ax = b$, missä A on $n \times n$ matriisi, numeerisessa ratkaisemisessa esiintyvää virhettä voidaan tutkia seuraavalla laskennallisella kokeella, jossa käytämme hyväksi edellä esitettyä ideaa kuntoisuusluvun säätöön. Ratkaisijana on `LUsolve`. Virheen mittarina

käytämme todellista virhettä, ts. konstruoimme lin. systeemin, jonka ratkaisukin on tunnettu. Annamme cond(A):n kasvaa ja piirrämme kuvan virheestä.

Seuraavassa kuvassa on esitetty virhe cond(A):n funktiona loglog-skaalassa.

Tämä on toteutettu ohjelmana `myrgcon.cpp` www-sivulla.

```
   cond(a)   residual      error
1.0000e+01  3.3601e-15  1.8444e-15
1.0000e+02  1.5906e-15  4.1836e-15
1.0000e+03  7.8554e-16  9.6393e-14
1.0000e+04  1.4100e-15  9.1327e-13
1.0000e+05  2.8682e-16  1.8822e-12
1.0000e+06  2.2814e-15  4.7712e-11
1.0000e+07  4.1732e-16  4.5108e-11
1.0000e+08  5.7220e-16  1.6954e-09
1.0000e+09  1.4402e-15  4.2031e-08
1.0000e+10  9.5060e-16  7.2847e-07
1.0000e+11  5.8237e-16  2.1276e-06
1.0000e+12  9.9959e-16  2.1141e-05
```



Johtopäätöksenä kuviosta todetaan, että käytetyssä loglog-akselistossa virheen ja kuntoisuusluvun välillä on likimain lineaarinen riippuvuus. Lisäksi todetaan, että residuaali on koko ajan samaa suuruusluokkaa vaikka virhe tulee 10^{10} kertaiseksi.

2.22. Sovellus PNS-ongelmiin. Astetta p olevan polynomin sovittaminen dataan $(x_j, y_j), j = 1, ..., m$, missä $x_j < x_{j+1}$ ja $m > p$, johtaa ylimäärättyyn lineaariseen yht.ryhmään. Olkoon sovitettava polynomi $f(w, x) = \sum_{j=0}^{p} w[j]x^{p-j}$. Yhtälöryhmä on

$$\begin{cases} f(w, x_1) = & y_1 \\ \vdots & \vdots \\ f(w, x_m) = & y_m \end{cases}$$

Käyttämällä C-kielen 0-kantaista indeksointia kerroinmatriisille A pätee $a[i][j] = x_{i+1}^{p-j}, i = 0, ..., m-1, j = 0, ..., p$ ja yhtälöryhmä voidaan kirjoittaa muotoon $Aw = y$ ja sen ratkaisu $w = A^+ y$ löydetään esim. `SVDsolve`:lla.

PNS-tehtävään liittyvät *normaaliyhtälöt* ovat

$$\frac{\partial S(w)}{\partial w_j} = 0; \qquad S(w) = \sum_{j=1}^{m} (f(w, x_j) - y_j)^2; \qquad j = 1, ..., m.$$

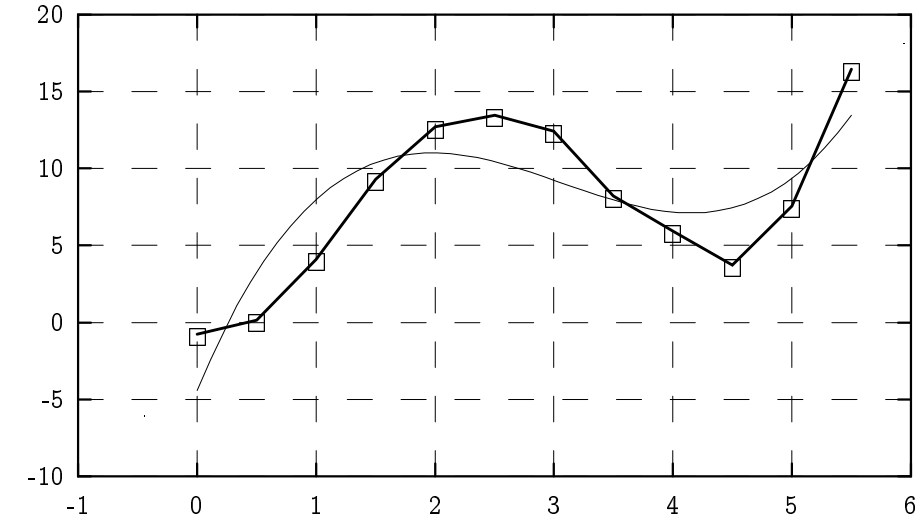
Siinä tapauksessa, että funktiolla $f(w, x)$ on muoto $\sum_{j=0}^{p} w_j g_j(x)$ (kuten polynomisovituksessa, jossa $g_j(x) = x^j$) osittaisderivoinnit on helppo laskea ja normaaliyhtälöt muodostavat lin. yhtälöryhmän kertoimille w_j. Kaava $w = A^+ y$ antaa näiden ratkaisun.

```
/* FILE: mypfit2.cpp begins.                                  */
/* g++ mypfit2.cpp -L../lib -I../utils -o mypfit2 -lm -lnr */

(.........)

Vec_DP polyfit(Vec_DP &x, Vec_DP &y, int deg )
{ int ndata=x.size();
  Vec_DP coef(deg+1);
  Mat_DP a(ndata,deg+1);
  if ((ndata<deg+1) ||(ndata!=y.size()))
    {cout<<"Argument error in polyfit\n" <<endl;
    abort();
    }
  for (int i =0;i<ndata;i++)
  for (int j=0;j<=deg;j++)
       a[i][j]=pow(x[i],(double)(deg-j));
  SVDsolve(a,y,coef);
```

```
  cout<<"Coefficient c= \n"<<coef<<endl;
  cout<<
"Format: c[0]x^p +c[1]x^{p-1} +...+ c[p]  ; p= c.size()-1\n";
  getchar();
  return coef;
}
int main()
{
  for (int poldeg=2;poldeg<7;poldeg++)
    {
      int mdata=poldeg+9;
      Vec_DP x(mdata), y(mdata), coef(poldeg+1);
      GenData(x,y);
      coef=polyfit(x,y,poldeg);
      PlotPolyData(x,y,coef);
    }
}
/* FILE: mypfit2.cpp ends.                                          */
```

Tulostuksesta:

```
Coefficient c=
    0.75599576 -6.9448571 18.579934 -4.4081638

Format: c[0]x^p +c[1]x^{p-1} +...+ c[p]  ; p= c.size()-1
```



2.23. PNS-sovitus annetuihin funktioihin. Edelläoleva `mypfit2.cpp` voidaan hyvin helposti muuntaa niin, että polynomifunktiot korvataan esimerkiksi trigonometrisilla tai muilla sopivilla funktiolla. Seuraavaksi katsomme miten tämä tapahtuu. Lähtökohtana meillä on annettu funktiojoukko, esimerkiksi $\{g_j(x)\}, j = 0, ..., p$, ja data $(x_i, y_i), i = 0, ..., m, m \geq p$. Etsimme PNS-mielessä parhaiten dataan sopivaa funktiota $\sum_{j=0}^{p} w[j] g_j(x)$. Muodostamme summan

$$S(w) = \sum_{i=0}^{m} (y_i - w[j] * g_j(x_i))^2$$

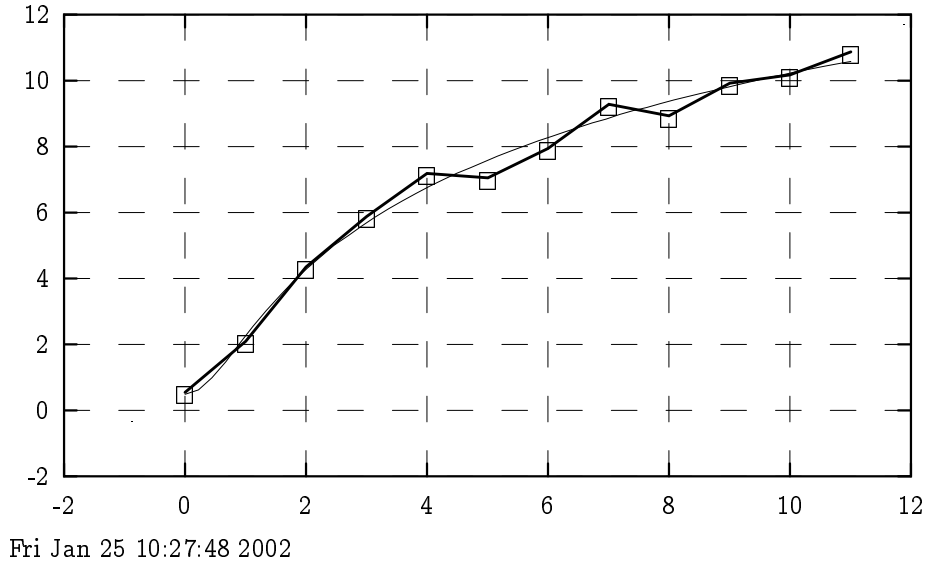
joka halutaan minimoida kertoimia $w[j]$ vaihtelemalla. Optimaalinen w saadaan `SVDsolve`:n avulla, kuten edellä nähtiin.

Tässä tehtävässä, kuten tällä kurssilla usein muulloinkin, on ongelmana mistä saadaan sopivaa dataa. Sovellamme *synteettisen datan menetelmää,* jolla tarkoitetaan seuraavaa. Kiinnitämme luvut m, p ja vektorit $x, \tilde{w}$, ja muodostamme y:n seuraavasti $y[i] = \sum_{j=0}^{p} \tilde{w}[j] g_j(x[i]), i = 0, ...m$. Lopuksi lisäämme vielä "satunnaisvirhettä" y:hyn. Näin muokattu data annetaan algoritmille syötteeksi. Siinä tapauksessa, että lisätty virhe on pientä, on odotettavissa, että algoritmin tuottama arvo sovitusparametrille w on lähellä arvoa $\tilde{w}$.

```
/* FILE: mylsqfit.cpp begins.                                    */
/* g++ mylsqfit.cpp -L../lib -I../utils -o mylsqfit -lm -lnr */
/* This program generates some data and fits
   in the  LSQ sense, a set of functions g_j, j=0,..,p,
   to this data.
   Data: x[i], y[i], i=0,...,n-1 (n>p)
   Model: f(x)=sum_{j=0}^{p}{w[j] g_j(x[i])}
   System of n-equations  f(x[i]) = y[i], i=0,...,n-1
   is of the form A w= y, A[i][j]=g_j(x[i]), j=0,...,p
   and its LSQ solution is w= A^+ y where A^+ is the
   pseudoinverse (A^T A)^{-1} A^T.
   SVDsolve gives w.
*/

(.........Ks. mypfit2...........)

double g(int j, double x)
```

```
{
  if (j==0) return 1.0;
  if (j==1) return log(1.0+x*x);
  if (j==2) return 1./(1+x*x);
  if (j==3) return x;
}

void GenData(Vec_DP &x, Vec_DP &y )
{
  int ndata=x.size();
  for (int i =0;i<ndata;i++)
    {x[i]= 1.0*i;
    y[i]= (1.0*g(0,x[i])+ 2.0*g(1,x[i])
          -0.5*g(2,x[i]))*rdm(0.9,1.1) ;}
}

DP MyModel(Vec_DP c, DP x)
  /* MyModel returns c[0]*g(0,x) + c[1]*g(1,x) + c[2]*g(2,x)
   p= c.size()-1 */
{ int m=c.size();
 if (m!=3)
   {cout<<"Argument arror in MyModel\n"; exit(1);}
 DP  s=0.0;
 for (int j=0;j<m;j++) s+= c[j]*g(j,x);
 return s;
}

void PlotPolyData(Vec_DP &x, Vec_DP &y, Vec_DP &coef)
{
(.............Ks. mypfit2 )
  for (int i=0;i<50;i++)
    yymodel[i]= MyModel(coef,xx[i]);
  MyPlot(x,y,xx,yymodel,x,y);
}

Vec_DP lsqfit(Vec_DP &x, Vec_DP &y, int nr_func )
{ int ndata=x.size();
 Vec_DP coef(nr_func);
 Mat_DP a(ndata,nr_func);
 if ((ndata<nr_func) ||(ndata!=y.size()))
   {cout<<"Argument error in polyfit\n" <<endl;
   abort();
   }
 for (int i =0;i<ndata;i++)
   for (int j=0;j<nr_func;j++)
```

```
     a[i][j]=g(j,x[i]);
 SVDsolve(a,y,coef);
 cout<<"Coefficient c= \n"<<coef<<endl;
 cout<<
   "Format: c[0]x^p +c[1]x^{p-1} +...+ c[p] ; p= c.size()-1\n";
 getchar();
 return coef;
}
int main()
{
  int mdata=12;
  Vec_DP x(mdata), y(mdata), coef(3);
  GenData(x,y);
  coef=lsqfit(x,y,3);
  PlotPolyData(x,y,coef);
}
/* FILE: mylsqfit.cpp ends.                                    */
```



2.24. Isotermit. Sääkartoissa lämpötilavyöhykkeet muodostavat alueita, joiden rajat merkitään käyrillä. Käyrä, jolla lämpötila on vakio, on nimeltään *isotermi*. Lämpötilavyöhykkeen reuna muodostuu yhdestä tai useammasta isotermistä. Isotermit muodostetaan sääasemien mittaustulosten perusteella.

Tarkastamme nyt tehtävää konstruoida isotermit säähavaintojen pohjalta. Tähän liittyen haluamme “ennustaa” isotermien avulla

lämpötilan muutamassa mittauspisteiden ulkopuolisessa paikassa.

Teemme ensin matemaattisen mallin lämpötilalle. Oletamme, että lämpötilaa kuvaa toisen asteen polynomifunktio

$$f(x, y) = w_0 x^2 + w_1 y^2 + w_2 xy + w_3 x + w_4 y + w_5,$$

jossa kerroinvektori w halutaan estimoida mittauksista. Ongelma on täsmälleen sama kuin edellä esitelty funktiosovitus, erityisesti se riippuu lineaarisesti w:n komponenteista ja johtaa PNS-yhtälöihin, jotka voimme ratkaista `SVDsolve`:lla.

Mallin toteutus voidaan jakaa seuraaviin osatehtäviin:

(1) kartan piirto
(2) havaintopisteiden merkitseminen karttaan
(3) tutkimuspisteiden merkitseminen karttaan
(4) isotermien piirto
(5) tulosten kirjoitus tutkimuspaikkakunnilla.

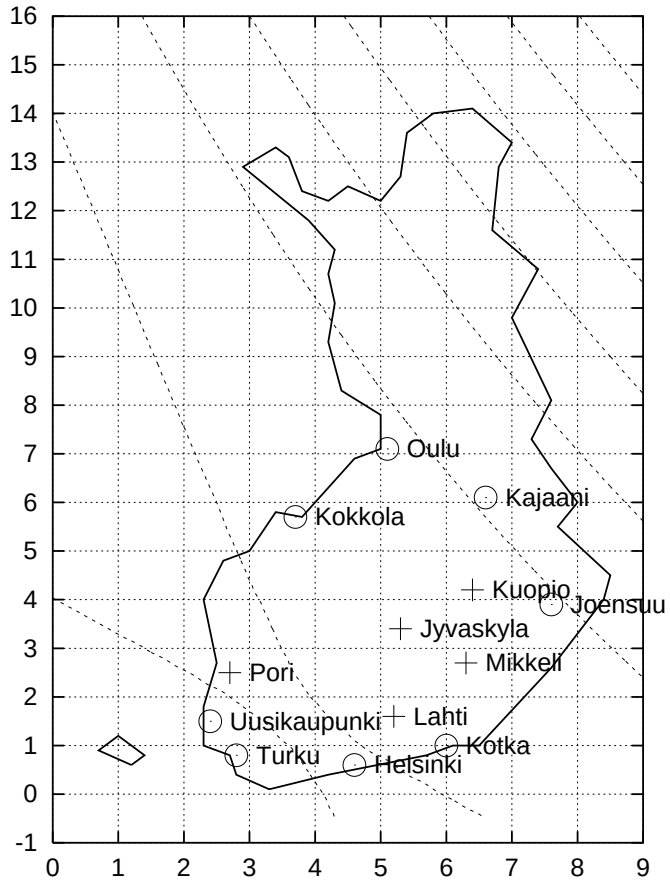
Lähtökohtana olevat säähavainnot

```
City name          xcrd      ycrd      Temp.
Helsinki            4.6       0.6       2.6
Kotka               6.0       1.0       1.6
Joensuu             7.6       3.9       0.2
Kajaani             6.6       6.1      -0.3
Oulu                5.1       7.1       0.7
Kokkola             3.7       5.7       1.3
Uusikaupunki        2.4       1.5       2.8
Turku               2.8       0.8       0.8
```

Tuloksena olevat lämpötilaennustukset:

```
City name        xcrd  ycrd  Real. temp. Estim. temp.
Jyvaskyla        5.30  3.40     0.30        1.52
Mikkeli          6.30  2.70     0.40        1.32
Lahti            5.20  1.60     0.90        1.88
Pori             2.70  2.50     1.00        2.04
Kuopio           6.40  4.20     0.40        0.77
```

```
Vektorin w kertoimet:

coef=   -0.055796284 -0.024153191 -0.095990948 0.56111105
         0.43611549 0.63546522
```



Ko. ohjelma `mytemp4.cpp` aputiedostoineen löytyy kurssin www-sivulta. Huomaa, että tämä malli tuottaa melko hyviä tuloksia kuten nähdään tulostuksesta. Kuitenkin mallia vastaan voidaan esittää kritiikkiä sikäli että lämpötilojen arvot vaihtelevat rajoitelulla välillä mutta mallina käytetyllä polynomifunktiolla ei ole tätä ominaisuutta.

2.25. Komentoriviargumentit C-ohjelmassa. Olemme jo Luvussa 1 nähneet, miten C-ohjelman syöttö ja tulostus voidaan suunnata tiedostoista tapahtuvaksi. Esim.

```
myprog <myprog.inp >myprog.out
```

ottaa syötteensä tiedostosta `myprog.inp` ja kirjoittaa tulosteensa tiedostoon `myprog.out`. Nyt esittelemme joustavamman ta-

van ohjelman toiminnan ohjaamiseksi ns. *komentoriviargumenttien* avulla. Näin toimittaessa komento

```
myprog 3 4 a.dat
```

voisi ohjata ohjelman lukemaan 3×4 matriisin tiedostosta `a.dat` tai kirjoittamaan sinne matriisin. Valmisteluna komentoriviargumenttien käytölle on pääohjelman alussa ilmaistava argumentit seuraavasti:

```
main(int argc, char *argv[ ])
```

Argumentit saavat arvoja vasta ajon aikana. Ohjelmakoodi voidaan siis tehdä riippuvaiseksi siitä millaisilla ja monellako argumentilla ohjelmaa kutsutaan. Kokonaisluvun `argc` arvo on yhtä suurempi kuin komentorivillä annettavien argumenttien lukumäärä ja merkkijono `argv[0]` sisältää ohjelman nimen. Yo. esimerkissä

```
argc = 4, argv[1] = "3", argv[2]= "4", argv[3] ="a.dat" .
```

Jatkossa tulemme useasti käyttämään komentoriviargumentteja. Katsomme nyt muutamia asiaa valaisevia esimerkkejä.

2.26. Tiedoston tulostus ruudulle. Ensimmäinen sovellus komentoriviargumenteista on seuraava ohjelma, joka pyytää käyttäjältä ASCII tiedoston nimen ja tulostaa sitten tiedoston sisällön kuvaruudulle.

```
/* FILE: myshow4.c begins                */
/* USES:.............                    */
/* Displays an ascii file on the screen */
/* Unix version                          */
#include <string.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>

int main(int argc, char *argv[])
```

```
{
  char dest[20]="more ",name[20];

  if(argc>2) {
    printf("\nUsage: myshow4 a.dat or myshow4 \n");
    exit(1);
  }
  if (argc==2) {
    strcat(dest,argv[1]);
    system(dest);
    exit(1);
  }
  system("ls -x | more");
  printf("Enter the name of an ASCII file:\n");
  scanf("%s",&name);
  printf("The file name you entered: %s\n",name);
  strcpy(dest,"");
  strcat(dest,"more ");
  strcat(dest,name);
  system(dest);
  return 0;
}
/* FILE: myshow4.c end */
```

2.27. Pieni laskin. Toinen esimerkkimme on pieni laskinohjelma `myfeval.cpp`, jonka avulla voidaan helposti esim. muuntaa eurot markoiksi. Tämä ohjelma käyttää apunaan ohjelmaa `dofeval.cpp`, jonka se myös kääntää systeemikutsulla.

```
/* FILE: myfeval.cpp begins            */
/*  g++ -Wall myfeval.cpp   -o a -lm   */
/* Function evaluator                  */
/* Usage: ./myfeval "sin(0.4)"         */
/* OR:   ./myfeval  "real(pow(complex<double>(0,1.0), 0.5))" */
/* Decimal point is important. Wrong result:
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/democpp02 ./myfeval "6*987654321"
 6*987654321  = 1630958630.00000000
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/democpp02 g++ -v
gcc version egcs-2.91.66 19990314/Linux (egcs-1.1.2 release)
Effect of a decimal point:
[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/democpp02 ./myfeval "6*987654321.0"
 6*987654321.0  = 5925925926.00000000
 */
```

```
#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
#include <complex>

using namespace std;

/*
double myohj10f(void)
{double t;
t= ....;
return t;
}
*/

/*  Write a function of the above format */
void write_func(char *cmdlarg )
{
  char *fname ="myfevalf.cpp";
  char *line1 ="double myfevalf( void)", *line2 ="{double t;",
       *line4 ="return t;}";
  FILE *fp;
  system("rm myfevalf.cpp");
  if ((fp =fopen(fname,"w")) ==NULL){
    printf("\nCannot open file %s", fname);
    exit(1);};
  fprintf(fp, " %s\n %s\n t= %s ;\n %s\n" ,
              line1,line2,cmdlarg,line4 );
  fclose(fp);
}

int main(int argc, char *argv[])
{
  char buff[256]="";
  if ((argc !=2))
    {printf("\nUsage: ./myfeval \"sin(0.4)\"  \n");
    printf("Or: ./myfeval \""
    "real(pow(complex<double>(0,1.0), 0.5))\"\n");
    exit(1);};
  if (argc ==2) {
```

```
    write_func(argv[1]);
    system("g++ dofeval.cpp  -o dofeval -lm");
    sprintf(buff,"%s %s %s %s",
            "./dofeval ", "\"",  argv[1],  "\"");
    system(buff);
  }
  return 0;
}
/* FILE: myfeval.cpp end                                    */


/* FILE: dofeval.cpp end                                   */
/*  g++ dofeval.cpp  -o dofeval -lm */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
#include <complex>
#include "myfevalf.cpp"

int main( int argc, char *argv[])
{
  double t=myfevalf();
  printf("%s = %16.8lf   \n",argv[1],t);
  return 0;
}
/* FILE: dofeval.cpp ends                                   */



./myfeval "6*12.34  "

6*12.34  =      74.04000000

Ohjelman kirjoittama funktio:

 double myfevalf( void)
 {double t;
 t= 6*12.34 ;
 return t;}
```

2.28. Graafinen laskin mycal. Seuraava kolmas esimerkki laajentaa edelläolevaa ideaa. Se osoittaa, miten C-kielen ja Gnuplotin yhteistoimintaa voidaan koordinoida siten, että Gnuplot toimii graafisen laskimen tavoin. Tämä hieman monimutkaisempi esimerkki osoittaa, miten komentoriviltä annettu, C-kielen tuntemista funktioista tehty C-kielen syntaksin mukainen funktio voidaan piirtää Gnuplotin avulla. Ohjelma rakentuu ajuriohjelman `mycal.cpp` ja apuohjelman `myta.cpp` yhteispeliin ja toimii seuraavasti:

1. Annetaan komento `./mycal ``sin(x+cos(x)) +x*x`` .`

2. `mycal` kirjoittaa annetun lausekkeen tiedostoon `mytaf.cpp` C++-funktioksi, joka on `myta.cpp`:n include-tiedosto.

Esimerkkimme tapauksessa kirjoitettava tiedosto on seuraava:

```
double mytaf(double x)
{ double t=0.0;
t= sin(x+cos(x)) +x*x ;
return t;}
```

3. Tämän jälkeen `mycal` systeemikutsulla kääntää ohjelman `myta.cpp`, joka puolestaan kirjoittaa tiedostoon funktion arvot ja Gnuplotin komentotiedoston ja edelleen systeemikutsulla käynnistää Gnuplotin piirtämään ko. tiedostossa olevan datan.

4. Huomaa lainausmerkit annetun funktiolausekkeen ympärillä.

```
/* FILE: mycal.cpp begin                                    */
// g++ mycal.cpp  -o mycal -lm
/* mycal writes a function and compiles myta.cpp
   for plotting the function */
/* USAGE: ./mycal "sin(x) +NR::bessj0(x)" */
/* OR: ./mycal "real(pow(complex<DP>(2.0*x,x),2.0))" */

/* USES: myta.cpp, gnuplot  */
/* DELETES: mytaf.cpp and writes it again */
/* 1 Jan. 1999, 20 Jan. 2002 */
```

```
#include <cstring>
#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>

using namespace std;


void wrtfunc(int dim, const char *fexpress, const char *funame, const char *filename)
/* Example:   wrtfunc(1,argv[1], "fnew123","fnew123.c");
  wrtfunc(3,argv[2], "fnew321","fnew321.cpp");
*/
{

  FILE *fp;
  const char *fname =filename;
  const char  *line2 ="{ double t=0.0;", *line4 ="return (double) t;}";
  const char *line6 ="{double t;";
  char buff[80], line1[80], line5[80];
  strcpy(buff,"");
  strcat(buff,"rm -f ");
  strcat(buff,filename);
  system(buff);
  strcpy(buff,"");
  strcat(buff,"double ");
  strcat(buff," ");
  strcat(buff,funame);
  strcat(buff,"(double x[])");
  strcpy(line1,"");
  strcpy(line1,buff);
  strcpy(line5,"");
  strcpy(line5, "double ");
  strcat(line5,funame);
  strcat(line5, "( double x)");
  fp= fopen(fname, "w");
  if (fp==NULL){printf("File error mycal.cpp"); exit(1);}
  if (dim >1)
    {
      fprintf(fp,"%s\n%s\n",line1, line2);
```

```
      fprintf(fp,"t= %s ;\n%s\n", fexpress,line4);
    }
  else
    {
      fprintf(fp,"%s\n%s\n",line5,line6);
      fprintf(fp,"t= %s ;\n%s\n", fexpress,line4);
    }
  fclose(fp);
}

int main(int argc, char *argv[])
{
  if (argc == 1)
    {printf("\nUsage: ./mycal \"sin(x)+NR::bessj0(x)\" \n");
     exit(1);};
  if (argc >=2) {
  wrtfunc(1,argv[1],"mytaf","mytaf.cpp");
  system("g++ myta.cpp -L../lib/  -I../utils -o myta -lm -lnr");
  system("./myta"); }
  return 0;
}
/* FILE: mycal.cpp end                                      */


/* FILE: myta.cpp begin                                    */
/* This is a slave program used by mycal.cpp */
/* USES: gnuplot  */
/* DELETES: mytaf.c and writes it again */
/* Writes z.dat */
/* Tested for g++ 2002-01-20 */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;

#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#include "mytaf.cpp"

void tabula()
```

```
{
  extern double mytaf(double);
  double x, dx, x1, x2,y, tmp;
  int i;
  FILE *fp;
  const char *fname, *name="z.dat";
  printf("Enter x1: \n");
  scanf("%lf", &x1);
  printf("Enter x2: \n");
  scanf("%lf", &x2);
  tmp=x1;   if (x2 < x1) {x1=x2; x2=tmp;}
  printf("Enter dx: \n");
  scanf("%lf", &dx);
  if (dx < 0) dx =-dx;
  if ( dx > fabs(0.5*(x2-x1))) dx=(x2-x1)*0.05;
  fname=getfname(name);
  fp =fopen(fname,"w");
  if (fp==NULL) {printf("File error in myta"); exit(1); }
  x=x1;
  do {
    y=mytaf(x);
    fprintf(fp,"%12.6e   %12.6e \n",x,y);
    x+=dx;
  } while (x <x2);
  fprintf(fp,"%12.6e   %12.6e \n",x2,mytaf(x2));
  printf("Values written in file %s \n",fname);
  fclose(fp);
  system("rm gnuplot.cmd");
  name="gnuplot.cmd";
  if ((fp =fopen(name,"w")) ==NULL){
    printf("\nCannot open file %s", name);
    exit(1);};
  fprintf(fp,"set grid\nset timestamp\n");
  fprintf(fp,"plot \"%s\" with lines \npause -1\n",fname);
  fprintf(fp,"set terminal postscript\nset output \"myta.ps\"\nreplot\n");
  fclose(fp);
  system("gnuplot gnuplot.cmd");
}
int main()
{
  tabula();
  return 0;
}
/* FILE: myta.cpp end                                        */
```

Ohjelma `mycal.cpp` käännetään käskyllä, joka ilmenee alussa olevista kommenteista. Huomaa, että `mycal.cpp` kääntää systeemikutsulla ohjelman `myta.cpp`.

2.29. 2D graafinen laskin. Seuraavassa esimerkissä teemme pinnanpiirtoon soveltuvan muunnelman `mycal2d.cpp` ohjelmasta `mycal.cpp`. Käännös:

`g++ mycal2d.c -o mycalc2d -lm .`

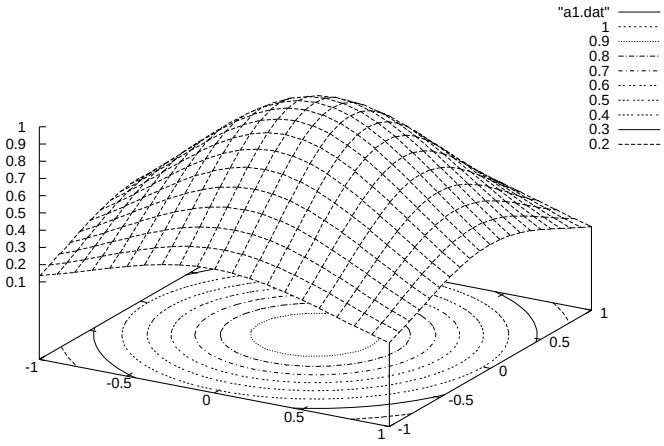
Komento: `./mycal2d ‘‘exp(-x*x-y*y)’’` ajaa ohjelman.

```
/* FILE: mycal2d.cpp begin */
/* g++ mycal2d.cpp -o mycal2d -lm  */
/* Example: ./mycalc2d "sin(x*y) +NR::gammln(x*y)"
   if no blank spaces, " " may be omitted */
/* ./mycal2d "real(NR::hypgeo(complex<double>(0.5,0),
              complex<double>(0.5,0),
              complex<double>(1.2,0),
              complex<double>(x,y)))" */
/* USES: mytas.cpp, gnuplot */
/* DELETES: mytasf.cpp and writes it again */
/* Tested only for g */
/* gcc: 1-Jan- 1999 g++: 1-Jan-2002 */

#include <string.h>
#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <math.h>

void write_func(char *cmdlarg)
{
  const char *fname = "mytasf.cpp";
  const char *line1 = "double mytasf(double x,double y)";
  const char *line2 = "{ double t=0.0;";
  const char *line4 = "return t;}";
  FILE *fp;

  system("rm -f mytasf.cpp");
  if ((fp = fopen(fname, "w")) == NULL)
  {
    printf("\nCannot open file %s", fname);
```

```
    exit(1);
  };
  fprintf(fp, "%s\n%s\n", line1, line2);
  fprintf(fp, "t= %s ;\n", cmdlarg);
  fprintf(fp, "%s\n", line4);
  fclose(fp);
}

int main(int argc, char *argv[])
{
  if (argc == 1)
  {
    printf("\nUsage: ./mycal2d \"sin(x*y)+NR::gammln(x*y)\" \n");
    exit(1);
  };
  if (argc >= 2)
  {
    write_func(argv[1]);
    system("g++ mytas.cpp -L../lib -I../utils -o mytas -lm -lnr");
    system("./mytas");
  }
  return 0;
}
/* FILE: mycal2d.cpp end */


/* FILE: mytas.cpp begin                   */
/* USES: gnuplot                           */
/* DELETES: mytasf.cpp and writes it again */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;

#include "nr.h"

extern double mytasf(double, double);

#include "mytasf.cpp"
```

```
void tabula()
{
  extern double mytasf(double, double);
  double x, y, fxy, dx, dy, x1, x2, y1, y2, tmp;
  int i;
  FILE *fp;
  const char *fname, *name = "mytas.dat";
  printf("Enter x-interval (x1 x2):\n");
  scanf("%lf%lf", &x1, &x2);
  printf("Enter dx:\n");
  scanf("%lf", &dx);
  printf("Enter y-interval (y1 y2):\n");
  scanf("%lf%lf", &y1, &y2);
  printf("Enter dy: \n");
  scanf("%lf", &dy);

  /* Checks begin */
  tmp = x1;
  if (x2 < x1)
  {
    x1 = x2;
    x2 = tmp;
  }
  tmp = y1;
  if (y2 < y1)
  {
    y1 = y2;
    y2 = tmp;
  }
  if (dx < 0)
    dx = -dx;
  if (dy < 0)
    dy = -dy;
  if (dx > fabs(0.5 * (x2 - x1)))
    dx = (x2 - x1) * 0.05;
  if (dy > fabs(0.5 * (y2 - y1)))
    dx = (y2 - y1) * 0.05;
  /* Checks end */

  fname = name;
  fp = fopen(fname,  "w");
  if (fp==NULL) { printf("File error mytas.cpp\n"); exit(1);}
  x = x1;
  y = y1;
  do
```

```
  {
    do
    {
      fxy = mytasf(x, y);
      fprintf(fp, "%12.6e %12.6e %12.6e\n", x, y, fxy);
      x += dx;
    }
    while (x < x2 + 1e-10);
    x = x1;
    fprintf(fp, "\n");
    y += dy;
  }
  while (y < y2 + 1e-10);
  printf("Values written in file %s \n", fname);
  fclose(fp);
  system("rm -f gnuplot.cmd");
  name = "gnuplot.cmd";
  fp = fopen(name, "w");
  if (fp==NULL) { printf("File error mytas.cpp\n"); exit(1);}
  fprintf(fp, "set contour\nset hidden3d\nset parametric\n");
  fprintf(fp, "splot \"%s\" with lines\npause -1\n", fname);
  fclose(fp);
}

int main(void)
{
  tabula();
  system("gnuplot gnuplot.cmd");
  return 0;
}
/* FILE: mytas.cpp end                                          */
```


"a1.dat"
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
1
0.9
0.8
0.7
0.6
0.5
0.4
0.3
0.2
0.1
-1
-0.5
0
0.5
1
-1
-0.5
0
0.5
1

3 INTERPOLOINTI JA EKSTRAPOLOINTI

Mittausaineistoon perustuvat arviointitehtävät johtavat tavallisesti interpolointi- ja ekstrapolointikysymyksiin. Näihin kysymyksiin johdutaan erilaisissa tekniikan, luonnontieteen ja tilastotieteen ongelmissa. Laaja sovellusalue on myös teollinen muotoilu ja tietokonegrafiikka, jonka haasteet ovat antaneet pontta alan voimakkaalle kehitykselle viime vuosina. Taylorin kaavan nojalla tiedämme, että polynomeilla voidaan approksimoida funktiota yhdessä pisteessä. Näin on luonnollista lähteä liikkeelle polynomeista ja käyttää niitä funktion approksimointiin tarkasteltavalla välillä. Muita, usein parempia, mahdollisuuksia ovat trigonometriset approksimaatiot, rationaalifunktiot tai splinit, palapolynomit.

Perustehtävä. Olkoon f tuntematon funktio, jonka arvot $y_1, ..., y_N$ tunnetaan vain pisteissä $x_1 < x_2 < ... < x_N$. Etsittävä arvio $f(x)$:lle kun x annettu.

Tehtävä on nimeltään *interpolointi* jos $x_1 \leq x \leq x_N$, muuten *ekstrapolointi*. Hyvä esitys aiheesta on teoksessa Stoer-Bulirsch [SB].

Ratkaisuidea. Oletetaan, että f on hyvin approksimoitavissa tunnettua tyyppiä olevilla funktioilla, joissa on N tuntematonta parametria $a_1, .., a_N$. (Usein f riippuu a_i:sta lineaarisesti). Saadaan N:n tuntemattoman yhtälöryhmä, jossa N yhtälöä ja josta tuntemattomat halutaan ratkaista.

Interpoloinnissa esiintyviä funktiotyyppejä:
-polynomi $a_2x^2 + a_1x + a_0$

-rationaalifunktio $\frac{a_1x+a_0}{c_1x+c_0}$

-splini eli "palapolynomi"ts. kullakin välillä $[x_i, x_{i+1}]$ interpolointifunktio on polynomifunktion rajoittuma tälle välille ja polynomin aste pysyy samana siirryttäessä välistä toiseen, mutta kertoimet voivat muuttua. Kahden polynomin liitospisteessä x_i mah-

dollisesti ehtoja derivaatan jatkuvuudelle

- eksponenttifunktioiden summa $a_2 e^{-x} + a_1 e^{-2x} + a_0$

Perustehtävän ratkaisussa on periaatteessa kaksi ratkaisuvaihetta:

1) Sovitetaan interpolointifunktio annettuihin datapisteisiin.

2) Määrätään funktion arvo annetussa pisteessä x.

Vaativuusluokka on $O(N^3)$ ($N \times N$ matriisin kääntö). Käytännössä toisin:

a) Valitaan naapuripiste x_i, y_i

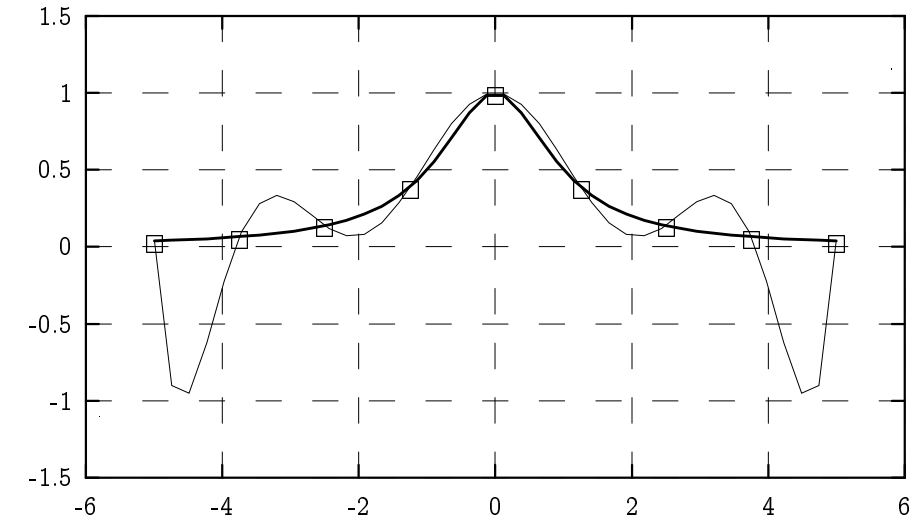
b) Huomioidaan muiden pisteiden vaikutus laskukaaviolla.

Vaativuusluokka $O(N^2)$, siis tehokkaampi kuin yllä.

Rungen ilmiö. Polynomi-interpoloinnissa ei datapisteiden lisääminen ja samalla polynomin asteen kasvattaminen välttämättä lisää tarkkuutta. NR suosittelee 3-6 pisteen käyttöä polynomi-interpoloinnissa. Olkoot $x_1 < x_2 < ... < x_N$ välin $[-5, 5] = I$ tasavälinen jako, $f(x) = 1/(1 + x^2)$ ja p_N arvoihin $(x_i, f(x_i))$ liittyvä interpolointipolynomi. Silloin voidaan todistaa, että pätee

$$\lim_{N \to \infty} \max_{x \in I} \{|p_N(x) - f(x)|\} = \infty.$$

Tällaisista ikävistä yllätyksistä päästään eroon käyttämällä splinejä. (Em. yllättävä ilmiö on peräisin Runge'n töistä /1901) ks. esim. Epperson Amer. Math.Monthly 94(1987,329-341) Gregory-Young (ks. kirjallisuusluettelo). Ohjelma `myrunge.cpp`, ks. www-sivu demoaa ilmiötä.



3.1. Polynomi-interpolointi ja ekstrapolointi.

Lagrangen kaava antaa pisteiden $(x_i, y_i),\ i = 1, ..., N,\ x_i < x_{i+1}$, kautta kulkevan polynomin muodossa

$$P(x) = \sum_{i=1}^{N} \prod_{j=1_{j\neq i}}^{N} [\frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} y_i]. \tag{1}$$

Neville'n taulu $P(x)$:n laskemiseksi ilman kaavaa (1):

$$\begin{array}{lllll} x_1 & y_1 = P_1 & & & \\ & & P_{12} & & \\ x_2 & y_2 = P_2 & & P_{123} & \\ & & P_{23} & & P_{1234} \\ x_3 & y_3 = P_3 & & P_{234} & \\ & & P_{34} & & \\ x_4 & y_4 = P_4 & & & \end{array}$$

P_{34} on pisteiden $(x_3, y_3), (x_4, y_4)$ kautta käyvän lineaarifunktion arvo x:ssä. P_{123} antaa pist. $(x_i, y_i), i = 1, 2, 3$, kautta kulkevan toisen asteen polynomin arvon x:ssä jne.

Yo. kaaviossa lausekkeiden P_* välillä vallitsee ns. *Neville'n kaavan* ilmaisema rekursiivinen yhteys, joka antaa interpolaatiopoly-

nomin arvon yhdessä pisteessä x :

$$P_{i(i+1)\ldots(i+m)} = \frac{(x - x_{i+m})P_{i(i+1)\ldots(i+m-1)} + (x_i - x)P_{(i+1)(i+2)\ldots(i+m)}}{x_i - x_{i+m}}.$$

Kaava todella antaa tytärpolynomin arvon x:ssä seuraavista syistä.

Perustelu: 1) Se on astetta korkeampi kuin $P_{i(i+1)\ldots(i+m-1)}$

2) $P_{i(i+1)\ldots(i+m-1)}(x_j) = y_j,\ j = i, i+1, \ldots, i+m-1$

$$P_{(i+1)\ldots(i+m)}(x_j) = y_j;\ j = i+1, \ldots, i+m$$

$\Rightarrow$ Neville'n kaavassa $P(x_j) = y_j$ kun $j = i, i+1, \ldots, i+m$.

Algoritmi `NR::polint` s.109.

Interpoloinnin eräs sovellus on numeerinen derivointi.

Interpoloinnin yhteydessä puhutaan joskus käänteisinterpoloinnista. Tällä tarkoitetaan "akselien vaihtoa" $(x_i, y_i) \rightarrow (y_i, x_i)$. Sen sovelluksena on funktion 0-kohdan etsimiseen, vrt. NR:n Luku 9.

Esim. Allaoleva ohjelma tuottaa astetta N olevan polynomin arvoja $N+1$ pisteessä (polynomin kertoimet ovat tunnettuja). Algoritmin `NR::polint` ja `NR::polcoe` avulla pyrimme löytämään ko. kertoimet.

```
// FILE: mypolin5.cpp begins
/* We have the values of a polynomial of degree n
   with known coefficients AGL at n+1 points
   x_i, y_i, i=0,...,n which we use as input data
   for polynomial interpolation with NR::polint.
   We also use NR::polcoe to see whether we can
   recover the original coefficients from this data.
*/

/*  g++ -Wall mypolin5.cpp -L../lib -I../utils -I../democpp02 -o a -lm -lnr  */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
```

```
#include <iostream>
#include <iomanip>

#include <cmath>
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
using namespace std;

double xmax=2.0;


DP myf(Vec_DP AGL,DP  x)
{
  int n=AGL.size();
  double s=AGL[n-1];
  for (int j=1;j<n;j++) s=s*x+AGL[n-j-1]; // Horner's rule
  return s;
}

void Gen_XYval(Vec_DP &x, Vec_DP &y,Vec_DP AGL)
{ int p=AGL.size();
  for (int i=0;i<p;i++)
    {x[i]=((DP)i)*xmax/(1.0*(DP)p);
     y[i]=myf(AGL,x[i]);     }
}

int main()
{
  DP dy,f,x,y;
  for (int n=2;n<=7;n++)
  {
    Vec_DP xa(n+1), ya(n+1), coef(n+1), AGL(n+1);
    for (int i=0;i<n+1;i++) AGL[i]=rdm(0.5,3.0);
    cout<<"\nPolyn. interpolation using "<<n+1<<" base points ";
    cout<<"on (0, xmax):\n";
    Gen_XYval(xa,ya,AGL);
    cout<<endl<<setw(9)<<"x"<<setw(14)<<"f(x)"<<setw(17);
    cout<<"interpolated"<<setw(20)<<"error"<<endl;
    for (int i=0;i<=2*n;i++)
    {
      x=((DP)i)*xmax/(2.0*(DP)n);
      f=myf(AGL,x);
      NR::polint(xa,ya,x,y,dy);
      cout<<endl<<setw(9)<<x<<setw(14)<<f<<setw(17);
      cout<<y<<setw(20)<<f-y<<endl;
```

```
    }
    NR::polcoe(xa,ya,coef);
    cout<<"Coefficients c_1 found:\n";
      cout<<coef ;
      cout<<"Coefficients c_2 of the data:\n";
    cout<<AGL;
    for (int i=0;i<coef.size();i++) coef[i]-=AGL[i];
    cout<<"norm(c_1-c_2)= "<<vnormp(coef,2.0)<<endl;
    //  getchar();
  }
  return 0;
}
// FILE: mypolin5.cpp ends
```

Ohjelman tulostusta:

```
Polyn. interpolation using 3 base points on (0, xmax):

        x          f(x)     interpolated               error
        0       2.60047          2.60047                   0
      0.5       3.95788          3.95788                   0
        1       6.54417          6.54417       -8.88178e-16
      1.5       10.3593          10.3593        1.77636e-15
        2       15.4034          15.4034        7.10543e-15
Coefficients c_1 found:
     2.6004693 1.4859573 2.4577481
Coefficients c_2 of the data:
     2.6004693 1.4859573 2.4577481
norm(c_1-c_2)= 1.7901808e-15

..........
```

Johtopäätöksenä ohjelman tulosteesta on, että polynomin oikeat kertoimet löytyivät (samat kuin `myf`:ssä).

3.2. Interpolointi ja ekstrapolointi rationaalifunktioilla. Rationaalifunktio $R_{i(i+1)\ldots(i+m)}$ on muotoa

$$R_{i(i+1)\ldots(i+m)} = \frac{P_\mu(x)}{Q_\nu(x)} = \frac{p_0 + p_1 x + \ldots + p_\mu x^\mu}{q_0 + q_1 x + \ldots + q_\nu x^\nu}$$

$m+1 = \mu + \nu + 1$.

Rationaali-interpolointi soveltuu myös tilanteisiin, jolloin polynomi-interpolointi ei käy (nimittäjän nollakohdat $\rightarrow R$:n ∞-kohdat). Algoritmi `NR::ratint` käyttää hyväksi Neville'n kaavan tapaista palautuskaavaa.

3.3. Kuutiosplini-interpolointi. Olkoon $x_1 < x_2 < ... < x_N$ ja vastaavat funktion arvot $y_1, ..., y_N$. Halutaan approksimoida funktiota välillä $[x_1, x_N]$ käyttäen approksimanttina funktiota g, jolla

(a) $g|[x_i, x_{i+1}]$ on kuutiopolynomi (kertoimet tavallisesti riippuvat i:stä)

(b) $\lim_{x \to x_i -} g''(x) = \lim_{x \to x_i +} g''(x)$ kaikissa liitospisteissä $x_i, i, 2 \leq i \leq N-1$.

(c) Kuten (b), mutta g':lle.

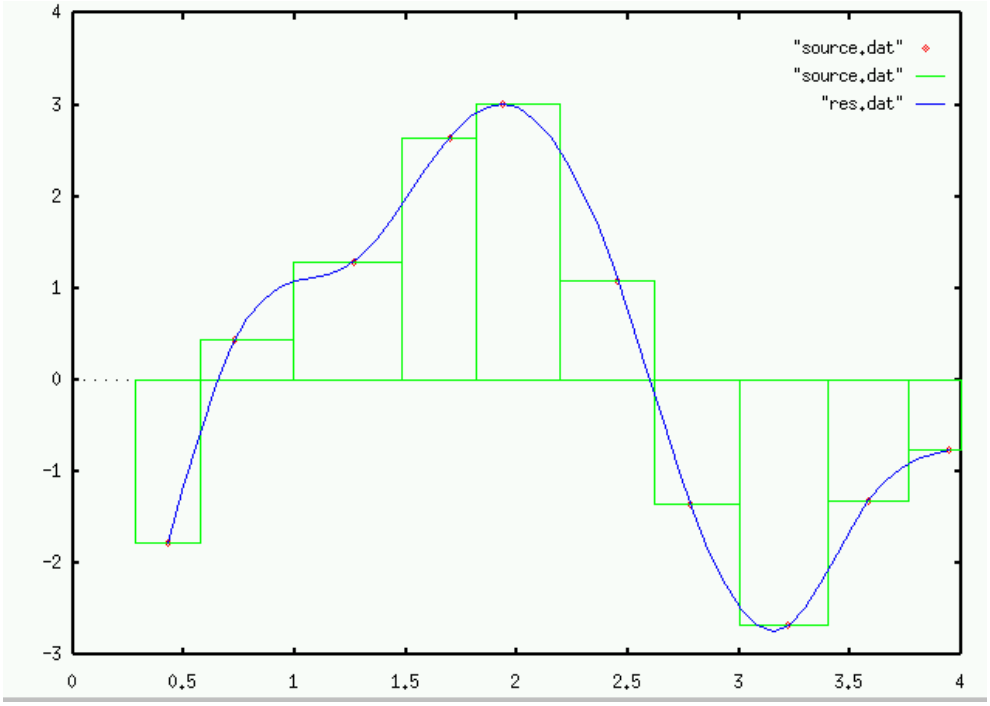
Yhtälöt (b) johtavat $N-2$:een yhtälöön N:lle tuntemattomalle $g''(x_i),\ i = 1, ..., N$. Jotta tuntemattomat määräytyisivät 1-käsitt. on asetettava lisäehdot päätepisteissä x_1 ja x_N. Tällöin on kaksi mahdollisuutta:

(a) aset. $g''(x_1) = 0$ tai $g''(x_N) = 0$ tai molemmat $= 0$ (ns. *luonnollinen splini*)

(b) aset. $g'(x_1)$ tai $g'(x_N)$ tai molemmat halutun suuruisiksi

Tällaista funktiota g kutsutaan *kuutiosplinikSi.*

Graafisesti splini-interpoloinnin vaikutusta voidaan havainnollistaa oheisella kuvalla, jossa laatikot ja käyrällä olevat pisteet kuvaavat alkuperäistä dataa. Splini-interpolointi tuottaa pisteiden kautta kulkevan sileän käyrän.



Algoritmin `NR::spline` toiminta

input: $x_1 < x_2 < ... < x_N$, $y_1, ..., y_N$ eli `xa`, `ya` ja lisäksi g':n arvot pist. x_1, x_N : `yp1`, `ypn` Asettamalla derivaattojen arvot `yp1`, `ypn` luvuksi 1E30 saadaan luonnollinen splini.

output g'':n arvot pist. $x_1, .., x_N$: `y2a`

Algoritmin `NR::splint` toiminta

input: x, x_i, y_i, y'' eli `x`, `xa`, `ya`, `y2a`

output: splini-approksimaation arvo pist. x

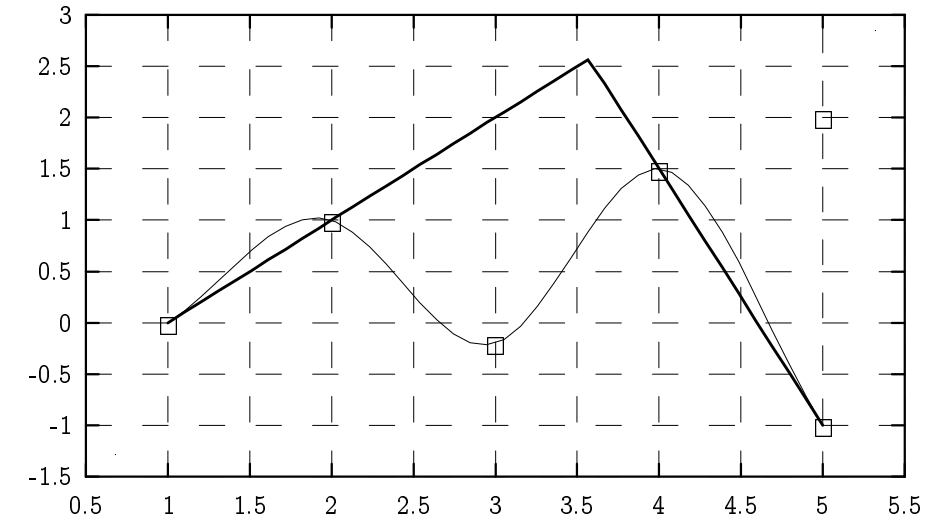
Reunaehto 1.derivaatan avulla. Seuraava ohjelma osoittaa, että siinä annetut ehdot ensimmäiselle derivaatalle ko. välin päätepisteissä toteutuvat, vrt. kuvio.

```
/* FILE: myspbr2.cpp                                                */
/*  g++ -Wall myspbr2.cpp -L../lib -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr  */

/* This program carries out spline interpolation to data.
   If the parameter BRYCOND ==1 the difference quotient
   of the data at the end points gives bry conditions
   for the derivative otherwise constant values specified
```

```
   in SplineWithBryVal are used.
*/

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;

#define PRINT 1
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#include "plot.h"

double pwlin(Vec_DP &dat, double x)
{
  double x1=dat[1],x2=dat[2],y1=dat[3], y2=dat[4],
    c1=dat[5],c2=dat[6], leikpis;
  if (dat[1] >dat[2]-1.0e-3) {x1=dat[2]; x2=dat[1]+1e-3;}
  if (fabs(c1-c2) <1.0e-3){
    if (x <0.5*(x1+x2)) return y1+c1*(x-x1);
    if (x >0.5*(x1+x2)) return y2+c2*(x-x2);}
  else {
    leikpis =(y1-y2+c2*x2-c1*x1)/(c2-c1);
    if (x <leikpis) return y1+c1*(x-x1);
    if (x >leikpis) return y2+c2*(x-x2);
  }  /* pwlin has slopes given by boundary */
  /* values of the derivative */
  return 1.0;
}

void   SplineWithBryVal(Mat_DP a,Vec_DP &xa,
                        Vec_DP &ya,Vec_DP &y2a,Vec_DP &dat, int brycond )
{
  int m=a.nrows();
  for (int j =0;j<a.nrows();j++)
    {xa[j]=a[j][0]; ya[j]=a[j][1];}
  double yp1, ypn;
  /* Set derivatives at end points */
  if (brycond == 0)
    {
     yp1=0.5;    ypn=-1.0;
```

```
    }
  else{
  yp1= (ya[2-1]-ya[1-1])/(xa[2-1]-xa[1-1]);
  ypn= (ya[m-1]-ya[m-2])/(xa[m-1]-xa[m-2]); }
  dat[1]=xa[1-1];      dat[2]=xa[m-1];
  dat[3]=ya[1-1];      dat[4]=ya[m-1];
  dat[5]=yp1; dat[6]=ypn; /*  dat[0] not used! */
  NR::spline(xa,ya,yp1,ypn,y2a);
}

void PlotDataSplineBryVal(Vec_DP &xa, Vec_DP &ya,
  Vec_DP &y2a,Vec_DP &dat, char *mydata)
{

  const char *fname ="z1.dat", *fnameb ="z2.dat";
  fnameb =getfname(fnameb);
  fname =getfname(fname);
  FILE *fp, *fpb;
  fp =fopen(fname,"w");
  fpb =fopen(fnameb,"w");
  if ((fp==NULL)||(fpb==NULL))
    {cout<<"File error in  PlotDataSplineBryVal"<<endl;
    abort();}
  int N=xa.size();
  if (N<40) N=40;
  double x,y;
  for (int j=0;j<=N-1;j++){
    x=xa[1-1]+(xa[xa.size()-1]-xa[1-1])*(j)/(N-1.0);
    NR::splint(xa,ya,y2a,x, y);
    fprintf(fp," %12.5lf %12.6lf\n",x,y);
    y=pwlin(dat,x);
    fprintf(fpb," %12.5lf %12.6lf\n",x,y);
  }
  fclose(fp);      fclose(fpb);
  plot(fname,"r-3",fnameb,"b-2",mydata,"ks4",NULL);
}

int main(int argc, char *argv[])
{
  int brycond;
  char *fname=argv[1];
  if (argc !=2){
    printf("Usage: ./myspbr fname1.dat  \n");
    exit(1);}
  Mat_DP a(1,1);
```

```
  a=getmat(fname);
  showmat2(a," %10.4lf");
  int m=a.nrows();
  Vec_DP xa(m),ya(m), y2a(m), dat(7);
  for (int j=0;j<2;j++)
    { brycond=j;
      SplineWithBryVal(a,xa,ya,y2a,dat,brycond);
      PlotDataSplineBryVal(xa,ya,y2a,dat,fname);
    }
}
/* FILE: myspbr2.cpp                                          */

/* Tested with: a.dat:
5 2
1 0
2 1
3 -0.2
4 1.5
5 -1
*/
```



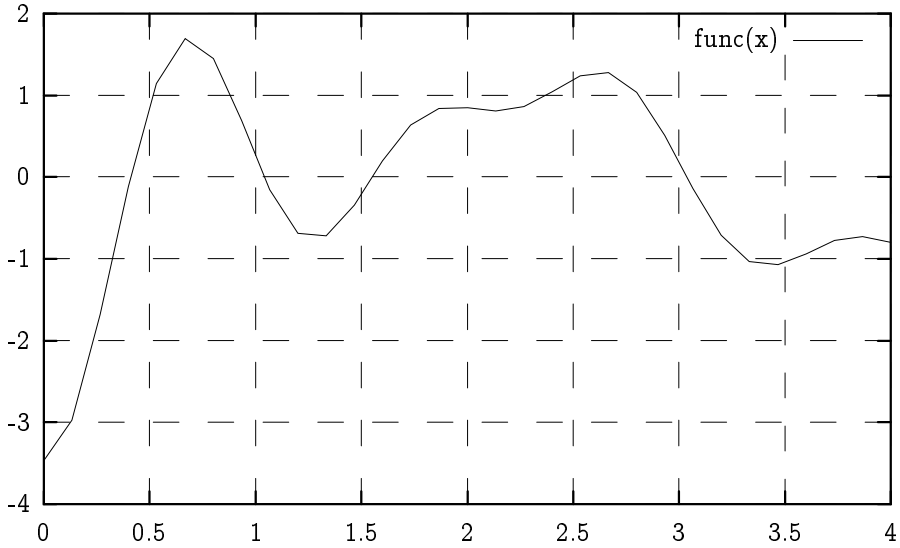
Fysikaalinen tulkinta : Pisteiden (x_i, y_i) kautta asetetun kimmoisan sauvan muoto on splini (sauvan "energia" $\int_{x_0}^{x_n} g''(s)ds$ pyrkii minimiinsä ko. rajoite-ehdoin).

```
// FILE: mysplint.cpp begin
```

```
/*  g++ -Wall mysplint.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -I../democpp02 -o a -lm -lr

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;

#include <cmath>

#define PRINT 1
#include "nr.h"

#include "matutl02.h"
#include "gnuplt1.h"

using namespace std;

#define N 20

int n_global;
DP yp1, ypn;
Vec_DP xa(N), ya(N), y2a(N);
DP a[N+1], b[N+1];
int M;

DP myfunc(DP x)
// myfunc gives the values of the sine sums
{
  DP s=0.0; int j;
  for (j=1;j<=M; j++)
    s-=a[j]*cos(b[j]*x)/b[j];
  return s;
}

DP dmyfunc(DP x)
// dmyfunc2 gives the derivative function of myfunc
{
  DP s=0.0; int j;
  for (j=1;j<=M; j++)
    s+=a[j]*sin(b[j]*x);
```

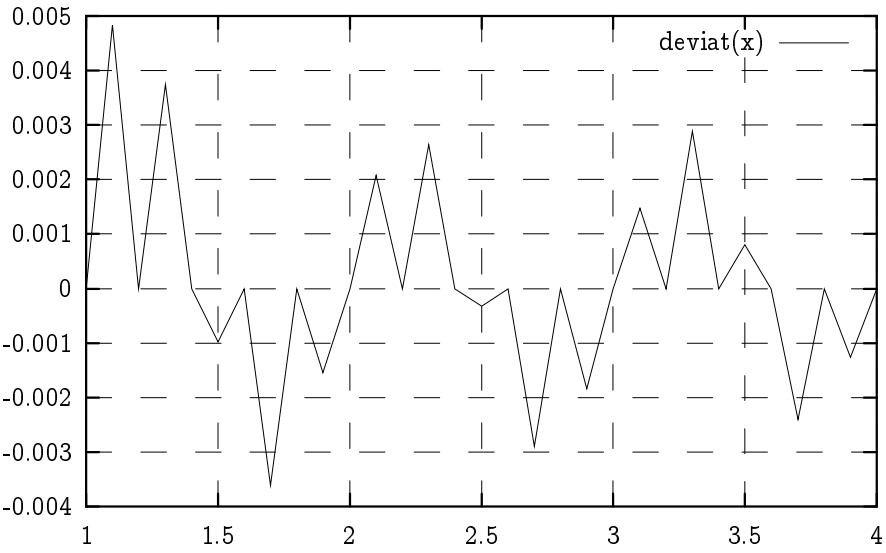
```
  return s;
}

DP fsint(DP x)
{
  DP y;
  NR::splint(xa,ya, y2a, x, y);
  return y;
}

DP deviat(DP x)
{
  DP y;
  NR::splint(xa,ya, y2a,  x, y);
  return y-myfunc(x);
}

int main()
{
  int i;
  DP x,y;
  M=7;                // Generate random coefficients
  init_srand();
  for (i=1;i<=M;i++)
  { // rdm is from matutl
    a[i]= rdm(0.0,3.0);
    b[i]=rdm(0.3,6.0);
  }
  // Generate array for interpolation
  for (i=1;i<=20;i++)
  {
    xa[i-1]=i*4.0/N;
    ya[i-1]=myfunc(xa[i-1]);
  }
  // calculate 2nd derivative with spline
  yp1=dmyfunc(xa[0]);
  ypn=dmyfunc(xa[N-1]);
  NR::spline(xa,ya,yp1,ypn,y2a);
  // test result
  cout<<setw(23)<<"spline"<<setw(17)<<"actual";
  cout<<setw(17)<<"error"<<endl;
  cout<<setw(11)<<"angle"<<setw(15)<<"value";
  cout<<setw(17)<<"value"<<endl;
  for (i=0;i<=15;i++) {
    x=4.0*i/15;
```

```
    NR::splint(xa,ya, y2a, x, y);
    cout.precision(2);
    cout<<setw(10)<<x;
    cout.precision(6);
    cout<<setw(17)<<myfunc(x)<<setw(17);
    cout<<y<<setw(17)<<y-myfunc(x)<<endl;
  }
  gnuplt1(myfunc,"myfunc(x)",0, NULL);
  gnuplt1(deviat,"deviat(x)",0, NULL);
  return 0;
}
// FILE: mysplint.cpp ends
```



Yllä on funktion `myfunc` kuvaaja. Alla osa ohjelman tulostuksesta sekä vielä virhefunktion `deviat` kuvaaja.

```
                spline           actual            error
     angle          value            value
         0       -3.87375         -3.79202        0.0817389
      0.27         -2.6557         -2.65475      0.000948754
      0.53       -0.0229636       -0.0236019     -0.000638306
       0.8          1.98268          1.98268                0
       1.1            2.242          2.24182     -0.000173306
       1.3           1.3447          1.34536      0.000658708
       1.6         0.548351         0.548351                0
..........
```



3.4. Järjestetyn vektorin läpikäynti. Oletetaan $x_1 < x_2 < ... < x_N$ ja $x \in \mathbb{R}$. Asetetaan $x_0 = -\infty$ ja $x_{N+1} = \infty$.

Tehtävä: Etsi j s.e. $x_j \leq x < x_{j+1}$. Silloin $0 \leq j \leq N$ ja jos $j = 0$ niin $x < x_1$ ja jos $j = N$ niin $x \geq x_N$.

Algoritmi `NR::locate` s.118 toteuttaa tämän.

Algoritmi `NR::hunt` toimii kuten `NR::locate`, mutta voidaan antaa alkuarvaus indeksille j.

3.5. Interpolointipolynomin kertoimet. Interpoloinnissa ei yleensä tarvita interpolointipolynomin kertoimia, halutaan vain laskea int. pol:n arvo annetussa pisteessä x (huomaa esitys on tavallisesti joko $y = c_0 + c_1 x + ... + c_N x^N$ tai $y = c_0 x^N + c_1 x^{N-1} + ... + c_N$.)

NR:n suositus: Jos tarvitaan vain interpol. polyn. arvoja, ei kertoimia ole syytä määrittää (ikäänkuin polynomin arvon laskemisen alkuvaiheena) vaan tulee käyttää aikaisemmin tässä luvussa esiteltyjä menetelmiä.

Perustelu: Kertoimien määrittäminen johtaa yhtälöryhmään

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{N-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{N-1} \\ \vdots & & \vdots & & \\ 1 & x_N & x_N^2 & \cdots & x_N^{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_N \end{bmatrix}$$

jonka matriisi (ns. *Vandermonden matriisi*) on häiriöaltis.

Jos c_i:t ratkaistaan tästä ja sen jälkeen lasketaan polynomin arvoja, ei yleensä saada samaa (oikeata) vastausta kuin `NR::polint`:sta.

Algoritmi `NR::polcoe` s.121 laskee kertoimet, `NR::polcof` s.121 samoin, tosin eri menetelmällä. Ohjelmassa `mypolin5.cpp` oli esimerkki `NR::polcoe`:n käytöstä.

3.6. 2-ulotteinen interpolointi. Olkoot

```
x1a[j], j=1,...,m, x1a[j]<x1a[j+1]
x2a[k], k=1,...,n, x2a[k]<x2a[k+1]
```

ja vastaavasti

```
ya[j][k]=y(x1a[j], x2a[k])
```

taulukoituja funktion arvoja. Haluamme määrittää funktion arvon interpoloinnilla taulukoitujen pisteiden ulkopuolella, pisteessä (x_1, x_2). Valitaan `j` ja `k` siten, että

`x1a[j]` $\leq x_1 \leq$ `x1a[j+1]`, `x2a[k]` $\leq x_2 \leq$ `x2a[k+1]`.

Merkitään

y_1 =`ya[j][k]`, y_2 =`ya[j+1][k]`,

y_3 =`ya[j+1][k+1]`, y_4 =`ya[j][k+1]`,

ja

`t=(` x_1 `-x1a[j])/(x1a[j+1]-x1a[j])` $\in [0,1]$

`u=(` x_2 `-x2a[k])/(x2a[k+1]-x2a[k])` $\in [0,1]$.

Bilineaarinen interpolointi-kaava $y(x_1, x_2)$:lle on

$$y(x_1, x_2) = (1-t)(1-u)y_1 + t(1-u)y_2 + tuy_3 + (1-t)uy_4.$$

Parannusmahdollisuuksia:

1) korvataan lineaarinen funktio polynomilla (korkeampien osittaisderivaattojen mahdollinen epäjatkuvuus)

2) pyritään "sileään"interpolointifunktioon

1. Polynomi-interpolointi

Idea: -M – 1:n kertal. interpolointi x_1-suunnassa

-N – 1:n kertal. interpol. x_2-suunnassa

Toteutus: Etsitään ensin $M \times N$ taulukkopistettä, annetun pisteen ympäriltä, (M x_1-suun. ja N x_2-suunn.) Tehdään M interpol. x_2 suunnassa, saadaan funktion arvot pist. `(x1a[j], x2 )`, `j=1,...,m`. Näiden avulla tehdään vielä yksi interpol. x_1-suuntaan, saadaan funktion arvo etsityssä pisteessä.

2. Bikuubinen interpolointi

Bikuubisessa (bicubic) interpoloinnissa kutakin solmupistettä kohti annetaan

$$(*) \qquad y, \partial y/\partial x_1, \partial y/\partial x_2, \partial^2 y/\partial x_1 \partial x_2.$$

Funktion arvojen lisäksi tarvitaan siis myös em. derivaatat.

Oheisena tilannetta havainnollistava kuva 3.6.1 NR:n sivulta 124.

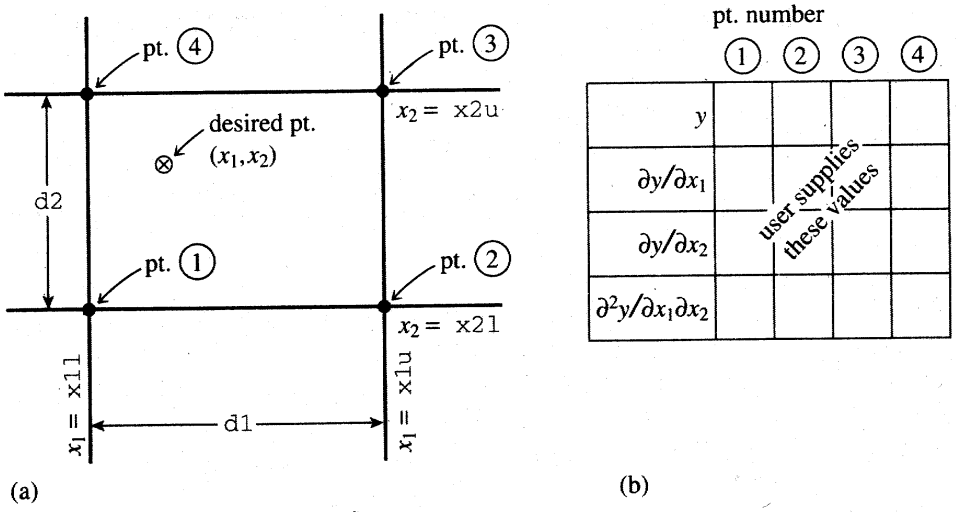


Figure 3.6.1. (a) Labeling of points used in the two-dimensional interpolation routines `bcuint` and `bcucof`. (b) For each of the four points in (a), the user supplies one function value, two first derivatives, and one cross-derivative, a total of 16 numbers.

Bikuubisen interpoloinnin ominaisuuksia:

(a) interpolointi antaa oikein takaisin em. arvot solmupisteissä

(b) interpoloinnin antama funktio on em. derivaattoineen jatkuva myös siirryttäessä "ruudusta"toiseen.

Bikuubisen interpolointipolynomin arvon laskeminen ruudun sisäpisteessä tapahtuu seuraavasti:

1) Annetaan kussakin ruudun kulmapisteessä 4 funktion tai derivaatan arvoa kuten yllä kaavassa (*) (siis yhteensä 16 arvoa).

2) Olk. $t, u \in [0, 1]$ kuten bilin. interpoloinnissa.

Silloin bikuubisen interpoloinnin kaavat ovat

$$y(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{4} c_{ij} t^{i-1} u^{j-1}$$

$$y_1'(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{4} (i-1) c_{ij} t^{i-2} u^{j-1}$$

$$y_2'(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{4} (j-1) c_{ij} t^{i-1} u^{j-2}$$

$$y_{12}''(x_1, x_2) = \sum_{i=1}^{4} \sum_{j=1}^{4} (i-1)(j-1) c_{ij} t^{i-2} u^{j-2}$$

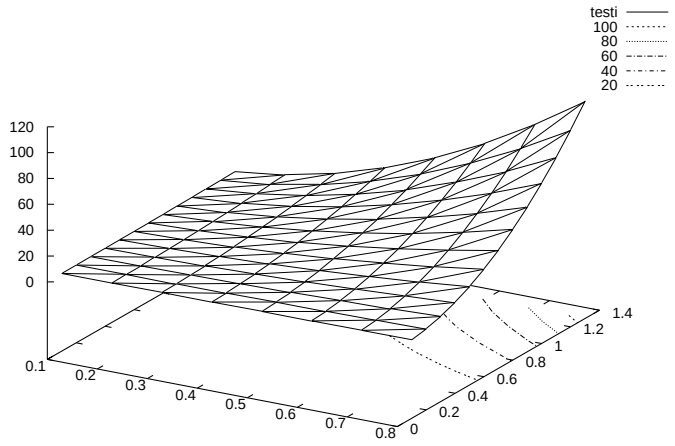
vakiot c_{ij} saadaan algoritmista `NR::bcucof` (laskennassa tarvitaan myös ruudun pituus D1 ja korkeus D2).

3) Varsinaisen interpoloinnin tekee `NR::bcuint`.

```
// FILE: mybcu.cpp begins
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
#include "nr.h"
#include "gnusurf.h"

#define SCALE 1

using namespace std;
```

```
// Driver for routine bcuint

const DP xx_d[4]={0.0,2.0,2.0,0.0};
const DP yy_d[4]={0.0,0.0,2.0,2.0};


DP f(DP x, DP y)
{
  return tan(cos(x)+sin(x))*sin(x+y);
}

DP ff(DP u, DP v)
{
  int i;
  DP ansy,ansy1,ansy2;
  DP x1,x1l,x1u,x2,x2l,x2u,xxyy;
  Vec_DP y(4),y1(4),y12(4),y2(4);
  Vec_DP xx(xx_d,4),yy(yy_d,4);

  x1l=xx[0];
  x1u=xx[1];
  x2l=yy[0];
  x2u=yy[3];
  for (i=0;i<4;i++)
  {
    xxyy=xx[i]*yy[i];
    y[i]=xxyy*xxyy;
    y1[i]=2.0*yy[i]*xxyy;
    y2[i]=2.0*xx[i]*xxyy;
    y12[i]=4.0*xxyy;
  }
  x1=u; x2=v;
  NR::bcuint(y,y1,y2,y12,x1l,x1u,x2l,x2u,
             x1,x2,ansy,ansy1,ansy2);
  return ansy;
}

int main(void)
{
  int i;
  DP ansy,ansy1,ansy2,ey,ey1,ey2;
  DP x1,x1l,x1u,x1x2,x2,x2l,x2u,xxyy;
  Vec_DP y(4),y1(4),y12(4),y2(4);
  Vec_DP xx(xx_d,4),yy(yy_d,4);
```

```
  x1l=xx[0];
  x1u=xx[1];
  x2l=yy[0];
  x2u=yy[3];
  for (i=0;i<4;i++)
  {
    xxyy=xx[i]*yy[i];
    y[i]=xxyy*xxyy;
    y1[i]=2.0*yy[i]*xxyy;
    y2[i]=2.0*xx[i]*xxyy;
    y12[i]=4.0*xxyy;
  }
  cout << endl << setw(6) << "x1" << setw(9) << "x2";
  cout << setw(8) << "y" << setw(12) << "expect";
  cout << setw(7) << "y1" << setw(11) << "expect";
  cout << setw(7) << "y2" << setw(11) << "expect" << endl << endl;
  cout << fixed << setprecision(4);
  for (i=0;i<10;i++) {
    x2=(x1=0.2*(i+1));
    NR::bcuint(y,y1,y2,y12,x1l,x1u,x2l,x2u,x1,x2,ansy,ansy1,ansy2);
    x1x2=x1*x2;
    ey=x1x2*x1x2;
    ey1=2.0*x2*x1x2;
    ey2=2.0*x1*x1x2;
    cout << setw(8) << x1 << setw(9) << x2 << setw(9) << ansy;
    cout << setw(9) << ey << setw(9) << ansy1 << setw(9) << ey1;
    cout << setw(9) << ansy2 << setw(9) << ey2 << endl;
  }
  double xxx[]={0.,2.},yyy[]={0,2.};
  gnusurf(ff,xxx,yyy,SCALE,0,"ff","testi");
  cout << "Program ended normally." << endl;
  return 0;
}
// FILE: mybcu.cpp ends
```



3. Muita mahdollisuuksia

Bikuubinen spline: Algoritmit `NR::splie2, splin2` s. 128.

3.7. Polynomien sovelluksia. Numeerinen derivointi. Seuraava esimerkki valaisee hieman numeerisen derivoinnin implementoinnin mahdollisuuksia teoksen [AS, 25.3.6] mukaisesti. Lähtökohtana on tasavälisesti taulukoidut funktion arvot. Haluamme löytää approksimaatiot derivaatan arvoille.

Arvoja on oltava vähintään kaksi kappaletta. Jos arvoja on tasan kaksi, voidaan derivaatan likiarvona käyttää erotusosamäärää $(y_2 - y_1)/(x_2 - x_1)$.

Tarkastamme seuraavaksi teoksen [AS], kohdan 25.3.6 mukaisesti tilannetta, kun arvoja on viisi. Olkoon $h > 0$, $p = -2, -1, 0, 1, 2$ ja taulukoidut funktion arvot $f_p = f(x_0 + ph)$. Silloin f:n numeerisella derivaatalla on lauseke (Abramowitz-Stegun, 25.3.6)

$$\begin{aligned} f'(x_0 + ph) &= [a * f_{-2} - b * f_{-1} + c * f_0 - d * f_1 + e * f_2]/h, \\ a &= (2 * p^3 - 3 * p^2 - p + 1)/12, \\ b &= (4 * p^3 - 3 * p^2 - 8 * p + 4)/6, \\ c &= (2 * p^3 - 5 * p)/2, \\ d &= (4 * p^3 + 3 * p^2 - 8 * p - 4)/6, \\ e &= (2 * p^3 + 3 * p^2 - p - 1)/12, \quad p = -2, -1, 0, 1, 2. \end{aligned}$$

Havaitaan, että derivaatan lauseke pisteessä $x_p, p = -2, -1, 0, 1, 2$ on "painotettu erotusosamäärä", jonka painokertoimet a, b, c, d, e riippuvat p:stä. Kertoimien numeeriset arvot ilmenevät seuraavasta kaaviosta:

p	a	-b	c	-d	e
-2	-25/12	24/6	-6/2	8/6	-3/12
-1	-3/12	-5/6	3/2	-3/6	1/12
0	1/12	-4/6	0/2	4/6	-1/12
1	-1/12	3/6	-3/2	5/6	3/12
2	3/12	-8/6	6/2	-24/6	25/12

Siinä tapauksessa, että taulukoituja arvoja on m kpl, $(m \geq 5)$, menetellään seuraavasti. Kohdassa $x_j, 2 \leq j \leq m-2$ sovelletaan yo. kaavaa arvoille $f_{j-2}, f_{j-1}, f_j, f_{j+1}, f_{j+2}$ tapauksessa $p = 0$. Kohdassa $x_j, j = 1, 2$ käytetään arvoja $f_1, ..., f_5$ ja kaavaa tapauksessa $p = -2$ tai vastaavasti $p = -1$. Pisteessä $x_j, j = m-1, m$ käytetään arvoja $f_{m-4}, ..., f_m$ ja kaavaa tapauksessa $p = 1$ tai vastaavasti $p = 2$.

```
// FILE: mynumder.cpp begins
// g++ mynumder.cpp -L../lib -I../utils -I../democpp02 -o a -lm -lnr

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>

using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"

#define MAXD 50
#define PI M_PI

using namespace std;
```

```
void numder(const Vec_DP seq1, Vec_DP &seq2, double h, int n)
/* A numerical approximation of the derivative of a function
   f is computed, given evenly spaced function values f[a+i h],
   i = 1,...,n, stored in seq1 in this order. The values of the
   derivative Df[a+i,h], i = 1,...,n are returned in seq2. The
   computation is based on the five-point formula in
   Abramowitz-Stegun 25.3.6. It is required that n >= 5. */
{
  int i, ilow = 1, ihigh = n, p, p2, p3;
  double a, b, c, d, e;

  if ((ihigh - ilow + 1) < 5)
    fprintf(stderr,"\nToo few points for numerical differentiation.\n");
  else
    for(i = ilow; i <= ihigh; i++) {
      if (i <= ilow + 2)
        p = i - ilow - 2;
      if ((i > ilow + 2) && (i <= ihigh - 2))
        p = 0;
      if (i > ihigh - 2)
        p = i - ihigh + 2;
      p2 = p * p;
      p3 = p * p2;
      a = ((2.0 * p3) - (3.0 * p2) - p + 1.0) / 12.0;
      b = ((4.0 * p3) - (3.0 * p2) - (8.0 * p) + 4.0) / 6.0;
      c = ((2.0 * p3) - (5.0 * p)) / 2.0;
      d = ((4.0 * p3) + (3.0 * p2) - (8.0 * p) - 4.0) / 6.0;
      e = ((2.0 * p3) + (3.0 * p2) - p - 1.0) / 12.0;
      seq2[i] = (a * seq1[i - p - 2]) -
        (b * seq1[i - p - 1]) +
        (c * seq1[i - p]) -
        (d * seq1[i - p + 1]);
      seq2[i] = (seq2[i] + (e * seq1[i - p + 2])) / h;
    }
}


double f(double x)
{
  return sin(x);
}

int main()
{
  double h=1e-5, x0 =1.1;
```

```
  Vec_DP y(6),dy(6);
  int i;
  for (i=1;i<=5;i++) y[i]= f(x0+(i-3)*h);
  numder(y,dy,h,5);
  printf("   x        df(x)          virhearvio \n");
  //cout.setf(ios::scientific);
  cout.precision(8);
  for (i=1;i<=5;i++)
  {
    cout<<setw(10)<<x0+(i-3)*h<<setw(12)<<dy[i];
    cout<<setw(20)<<dy[i]- cos(x0+(i-3)*h)<<endl;
  }
  return 0;
}
// FILE: mynumder.cpp ends
```

Ohjelman tulostus on seuraava:

```
  x        df(x)          virhearvio
   1.09998  0.45361395      -6.2296244e-11
   1.09999  0.45360503       4.0718258e-12
       1.1  0.45359612       8.7911403e-12
   1.10001  0.45358721      -6.5398544e-13
   1.10002   0.4535783       2.3879404e-11
```

Seuraava ohjelma numdf tarjoaa hieman joustavamman kutsutavan ja joitakin lisäominaisuuksia ohjelmaan numder verrattuna, jota numdf kutsuu. Laskemme välillä (a, b) määritellyn funktion numeeriselle toiselle derivaatalle likiarvon pisteessä x. Tarkoitusta varten laskemme ensin funktion arvot pisteissä $x + ph, p = -2, -1, 0, 1, 2$, ja huolehdimme siitä, että $a < x - 2h$ ja $x + 2h < b$. Sovellamme ohjelmaa numder funktion arvojen muodostamaan taulukkoon.

```
// FILE: mynumdf.cpp begins
// g++ mynumdf.cpp -L../lib -I../utils -I../democpp02 -o a -lm -lnr

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
```

```
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include<cmath>

using namespace std;
#include "nr.h"

#include "numder.cpp"

using namespace std;

double numdf(double f(double),double a,double b,double x,double h,int n)
/* A numerical approximation of the derivative of a function
   f defined on (a,b) is computed at x. The
   computation is based on the five-point formula in
   Abramowitz-Stegun 25.3.6 with step h. If x <a+2h or x>b-2h
   the step length if reduced.  */
{
  int i;
  Vec_DP seq1(6),seq2(6);
  double dx =h;
  if (( x <= a) || (x>=b))
  {
    cerr<<"\n Argument error in numdf, x = "<<x<<endl;
    exit(1);
  }
  if (x-2*h < a) dx= (x-a)/3;
  if (x+2*h > b) dx= (b-x)/3;
  for (i=1;i<=5;i++) {seq1[i] = f(x+(i-3)*dx);}
  numder(seq1,seq2,dx,5);
  if (n == 2) {
    numder(seq2,seq1,dx,5);
    return( seq1[3]);
  }
  else if (n==1) return(seq2[3]);
  else return 0.0;
}

double f(double x)
{
  return sin(x);
}

double tst(double x)
{
```

```
  return (f(x) +numdf( f, x-1.0, x+1.0, x, 1E-5, 2));
}

int main()
{
  double x;
  int i;
  cout<<"        x     D(D(sin(x)))     virhearvio \n";
  // cout.setf(ios::scientific);
  cout.precision(6);
  for (i=1;i<=5;i++) {
    x=0.1*i;
    cout<<setw(10)<<x<<setw(14)<< numdf( f, x-1.0, x+1.0, x, 1E-5, 2);
    cout<<setw(18)<<tst(x)<<endl;
  }
  return 0;
}
// FILE: mynumdf.cpp ends
```

```
        x     D(D(sin(x)))     virhearvio
      0.1    -0.0998333        1.1473e-07
      0.2     -0.198669       2.74021e-07
      0.3      -0.29552      -6.09202e-08
      0.4     -0.389419      -8.96643e-07
      0.5     -0.479426      -4.26042e-07
```

3.8. Käyrä annettujen pisteiden kautta. Annetun n:nnän tasopisteen $(x[i], y[i]), i = 1, ..., n$, kautta voidaan piirtää jokin tasokäyrä seuraavasti. Olkoon $t[i]$ = pisteestä 1 pisteeseen i välipisteiden kautta piirretyn murtoviivan pituus. Etsitään käyrän parametrimuotoista yhtälöä muodossa $(p(t), q(t))$ (huomaa, että tasokäyrää ei yleisesssä tapauksessa voi antaa muodossa $y = f(x)$), missä $(p(t[i]), q(t[i])) = (x[i], y[i])$, $i = 1, ..., n+1$ ja p ja q ovat sopivia interpolointifunktioita. Käyttäen ohjelmaa `gnuplt1` teemme nyt ohjelman, joka merkitsee pisteet kuvaruudulle ja piirtää niiden kautta splini-interpoloinnin antaman käyrän. Jos haluttaisiin, että käyrä olisi umpeutuva, olisi asetettava viimeinen piste samaksi kuin en-

simmäinen. Voitaisiin myös kokeilla esim. polynomi-interpolaatiota samaan tarkoitukseen.

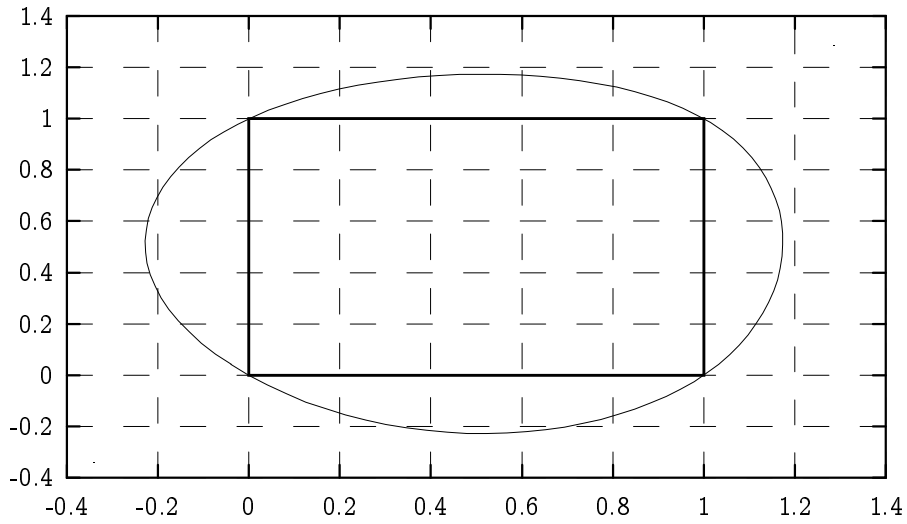
```
// FILE: mysptrp2.cpp begins

// Spline through points. Given a set of points
// in the plane, a curve is drawn through these points.
// Points are in the file myspt.dat
/*  g++ -Wall mysptrp2.cpp -L../lib -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;

#include <cmath>
#include "nr.h"
#define PRINT 1

#include "matutl02.h"
#include "plot.h"


#define NP 20
#define MP 20
#define MAXSTR 80

static void tabf(Vec_DP &xx,Vec_DP &yy ,int n,const char *name)
{
  ofstream df(name);
  int i;
  if (!df)
    abort();
  for (i = 0; i < n; i++) {
    df<<xx[i]<<" "<< yy[i]<<endl;
  }
  df.close();
}
```

```
DP dist(DP x1, DP y1, DP x2, DP y2)
{
  return pow( (x1-x2)*(x1-x2)+(y1-y2)*(y1-y2), 0.5);
}

void getpoints(Vec_DP &Xa, Vec_DP &Ya1, Vec_DP &Ya2, int &number)
{
  int j;
  const char *fname= "mysptrp3.dat";
  Mat_DP a(MP,NP);
  a=getmat(fname);
  showmat(a);
  int n = a.nrows();
  number=n;
  cout<<"number = "<<n<<endl;
  Vec_DP ya1(n);
  Vec_DP ya2(n);
  Vec_DP xa(n);
  for (j=0;j<n; j++)
    {
      (ya1)[j]=a[j][0];
      (ya2)[j]=a[j][1];
    }
  (xa)[0]=0.0;
  for (j=0;j<n-1; j++) {
    (xa)[j+1]=(xa)[j]+dist((ya1)[j], (ya2)[j], (ya1)[j+1], (ya2)[j+1]);
    cout<<setw(10)<<j<<setw(16)<<(xa)[j+1]<<endl;
  }
  Xa=xa;
  Ya1=ya1;
  Ya2=ya2;
  cout<<"Press enter:";
  getchar();
}

int main()
{
  DP a,b,x,y,yp1, ypn;
  int n, j, m;
  Vec_DP xa(1),ya1(1),ya2(1),xx(100),yy(100);
  //    yp1 =0.3; ypn=1/0.3;
  // yp1 =1e30; ypn =1e30 Luonnollinen splini
  getpoints(xa,ya1,ya2,n);
  //  n=xa.size();
  Vec_DP y2(n),y3(n);
```

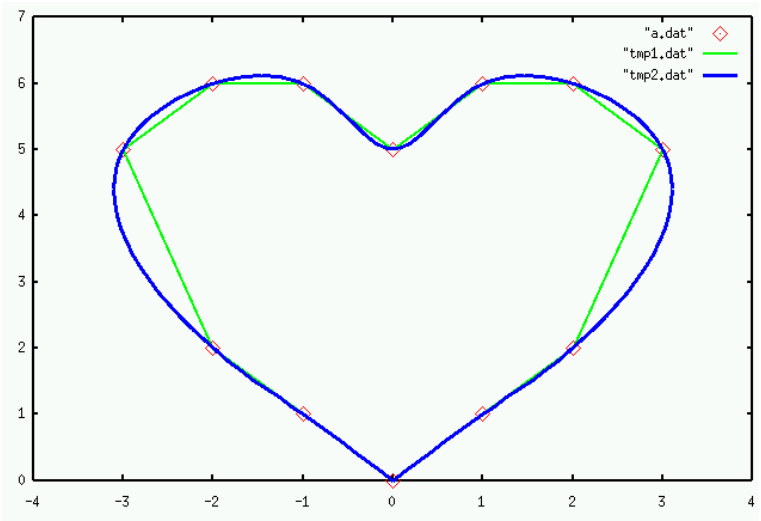
```
  tabf(ya1,ya2,n,"tmp1.dat");
  yp1 = ((ya1)[1] - (ya1)[0]) / ((xa)[1] - (xa)[0]);
  ypn = ((ya1)[n-1] - (ya1)[n-2]) / ((xa)[n-1] - (xa)[n-2]);
  yp1 = ypn = yp1 + ypn;
  NR::spline(xa, ya1, yp1, ypn, y2);
  yp1 = ((ya2)[1] - (ya2)[0]) / ((xa)[1] - (xa)[0]);
  ypn = ((ya2)[n-1] - (ya2)[n-2]) / ((xa)[n-1] - (xa)[n-2]);
  yp1 = ypn = yp1 + ypn;
  NR::spline(xa, ya2, yp1, ypn, y3);

  a=(xa)[0]; b=(xa)[n-1];
  m=100;
  for (j=0;j<100;j++) {
    x=a+(b-a)*(j-1)/99;
    NR::splint(xa,ya1,y2,x,y);
    xx[j]=y;
    NR::splint(xa,ya2,y3,x,y);
    yy[j]=y;
    cout<<j<<setw(14)<<xx[j]<<setw(14)<<yy[j]<<endl;
  }
  tabf(xx, yy,100, "tmp2.dat");
  plot("tmp1.dat","b-3",
       "tmp2.dat","r-2",NULL);
  return 0;
}
// FILE: mysptrp2.cpp ends

/*
TIEDOSTO mysptrp2.dat:

5 2
0 0
1 0
1 1
0 1
0 0
*/

/*
TIEDOSTO mysptrp.dat:

5 2
0 0
1 0
1 1
```

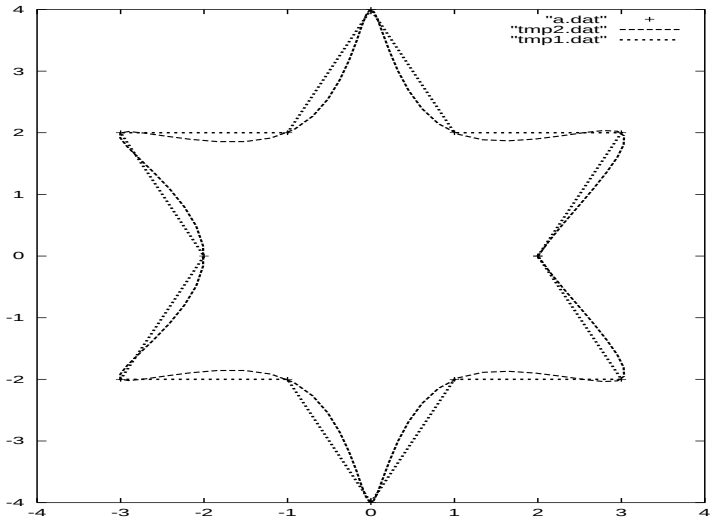
```
0 1
0 0
*/

/*
TIEDOSTO mysptrp3.dat:

5 2
0 0
1 0
1 1
0 1
0 0
*/


Generoitu spline-tiedosto:
0.000000 0.000000
0.040908 -0.038492
0.082737 -0.073206
0.125362 -0.104214
0.168655 -0.131586
(.....................)
-0.155392 0.212488
-0.131586 0.168655
-0.104214 0.125362
-0.073206 0.082737
-0.038492 0.040908
0.000000 0.000000
```

Samalla menetelmällä voidaan helposti generoida muita vastaavia kuvia.



Mon Feb 04 01:21:02 2002




"a.dat"
"tmp2.dat"
"tmp1.dat"
4
3
2
1
0
-1
-2
-3
-4
-4
-3
-2
-1
0
1
2
3
4

4 NUMEERINEN INTEGROINTI

Pinta-alojen ja tilavuuksien määritysongelmat ovat eräitä matematiikan vanhimpia sovelluskohteita. Nämä ongelmat voidaan palauttaa integraalien laskemiseen. Koska vain suhteellisen harvat integraalit pystytään laskemaan eksaktisti, käytetään tavallisesti likiarvoja ja numeerista integrointia. Numeerisen integroinnin synonyymi on kvadratuuri. Kvadratuurimenetelmiä käytetään mm. osana ns. elementtimenetelmää, joka on osittaisdifferentiaaliyhtälöiden numeerinen ratkaisumenetelmä.

Numeerisen integroinnin perustehtävä: Laske $\int_a^b f(x)dx$, kun f on jatkuva ja $-\infty < a < b < \infty$.

Mahdollisia ongelmatilanteita:

a) epäoleellinen integraali: f:llä äärettömyyspisteitä,

b) f:n raju heilahtelu, terävät huiput.

Tarpeen vaatiessa tehdään lisärajoituksia. Esimerkiksi, jos integroitava funktio on luokassa C^4, niin kvadratuurikaavoille voidaan johtaa virhearvioita (vrt. allaolevat kaavat).

Tavoite: Pyritään saavuttamaan mahdollisimman hyvä approksimaatio määrätylle integraalille mahdollisimman harvoilla funktion arvojen määrityksillä.

Avoin kvadratuuri ei käytä päätepistearvoja $f(a),\ f(b)$.

Suljettu kvadratuuri käyttää päätepistearvoja.

Avoin kvadratuuri voi soveltua myös tapauksiin "$|f(a)| = \infty$, tai $|f(b)| = \infty$."

Suljetulla välillä jatkuvaa funktiota numeerisesti integroitaessa voidaan muodostaa välin $[a, b]$ tasavälinen jako kiinteään määrään osavälejä ja kullakin osavälillä käyttää pinta-alojen approksimointiin suorakulmioita tai puolisuunnikkaita. Toinen mahdollisuus on soveltaa saman idean kehittyneempiä versioita ns. kvadratuurikaavoja. Ne voivat perustua approksimoivien jakojen tihennyksiin tai funktion kasvua tai heilahtelua huomioivien painofunktioiden käyttöön.

Piirtämällä kuvaaja saadaan visuaalinen vaikutelma funktion kulusta. Jos funktio heilahtelee rajusti, voidaan varautua vaikeuk-

siin numeerisessa integroinnissa. Analyysin kielellä ilmaistuna heilahtelu näkyy siinä, että funktion korkeammat derivaatat kasvavat, jolloin myöskin virhearvio kvadratuurikaavoissa huononee.

4.1. Tasaväliset jaot. Merkitään $x_i = x_0 + ih,\ i = 0, 1, ..., N + 1,\ f_i = f(x_i)$. Tärkeimpiä kvadratuurikaavoja ovat

1) Puolisuunnikaskaava (trapetsikaava):

$$\int_{x_1}^{x_2} f(x)dx = h[\frac{1}{2}(f_1 + f_2)] + o(h^3 f'').$$

2) Simpsonin kaava:

$$\int_{x_1}^{x_3} f(x)dx = h[\frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{1}{3}f_3] + O(h^5 f^{(4)}).$$

3) Simpsonin $\frac{3}{8}$ kaava:

$$\int_{x_1}^{x_4} = h[\frac{3}{8}f_1 + \frac{9}{8}f_2 + \frac{9}{8}f_3 + \frac{3}{8}f_4] + O(h^5 f^{(4)}).$$

N-pisteen kaavoja. (suljettu tapaus) Tihentämällä jakoa ja soveltamalla tihennettyyn jakoon em. kaavoja saadaan seuraavat kaavat.

a) **Puolisuunnikaskaava, N-pistettä:** Algoritmi `NR::qtrap`

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)dx = h[\frac{1}{2}f_1 + f_2 + ... + f_{N-1} + \frac{1}{2}f_N] + O(\frac{(b-a)^3 f''}{N^2}).$$

b) **Simpsonin kaava, N-pistettä:** Algoritmi `NR::qsimp`

$$\int_{x_1}^{x_N} f(x)dx = h[\frac{1}{3}f_1 + \frac{4}{3}f_2 + \frac{2}{3}f_3 + \frac{4}{3}f_4 + ... + \frac{2}{3}f_{N-2} + \frac{4}{3}f_{N-1} + \frac{1}{3}f_N] + O(\frac{1}{N^4})$$

Eräs menetelmä kaavojen 1)-3) ja niiden erilaisten varianttien johtamiselle perustuu määräämättömien kertoimien menetelmään kuten edellä jo nähtiin ohjelman `mynumint.cpp` yhteydessä. Kaavoissa esiintyvät kertoimet saatiin testaamalla kaavaa monomifunktioille ja ratkaisemalla muodostuva lineaarinen yhtälöryhmä.

4.2. Jaon tihennys. Edellä mainittuja integrointikaavoja voidaan käyttää myös iteratiivisesti siten, että jakopisteitten väliin asetetaan uusia jakopisteitä. Tällöin voidaan jo laskettuja funktion arvoja käyttää hyväksi, joten laskennan aikaisemmassa vaiheessa tehty työ ei mene hukkaan. Jaon tihentämistä jatketaan kunnes haluttu tarkkuus saavutetaan. Algoritmi `NR::trapzd, qtrap`.

4.3. Rombergin metodi. Tasavälisessä jaossa, jossa jakopisteiden välimatka on h, integraalille saatu approksimaatio $I(h)$ riippuu parametrista h. Jakoa tihennettäessä muodostetaan pienenevä äärellinen jono h_j lukuja $h_j > 0$, ja kullekin lasketaan vastaava approksimaatio $I(h_j)$. Jaon tihennystä voidaan käyttää systemaattisesti hyväksi. Ns. Rombergin menetelmässä tämä tapahtuu seuraavasti. Lasketaan puolisuunnikaskaavan antamia arvoja $I(h_i)$ integraaleille $\int_a^b f(x)dx$ vastaten välinpituuksia $h_i,\ i = 1, ..., n$, missä $h_i > h_{i+1}$. Ekstrapoloidaan Neville'n algoritmin avulla tilanteeseen $h = 0$. Asiasta on perusteellinen selostus kirjassa Stoer-Bulirsch [SB]. Algoritmit `NR::qromb, qromo` liittyvät Rombergin menetelmään.

Alla on esitetty ohjelmien käyttöesimerkki tapauksissa, joissa integraali voidaan laskea myös eksaktisti.

```
// FILE: myqromo.cpp begins
//  g++ myqromo.cpp -L../lib
#include<iostream>
#include<iomanip>
#include<cmath>
#include "nr.h"

using namespace std;

#define X1 0.0
#define X2 1.0
#define X3 10000
```

```
#define AINF 1.0E20
#define PI M_PI

DP globalp=2.0;

static DP ff(DP x)
{
  return  (pow(x, -1.0/globalp)) ;
}

int main()
{
  DP result,res2;
  int p;
  cout<<"\nImproper integrals:\n\n";
  cout<<"\n int_0^1 x^{-1/p} dx = p/(p-1): \n \n";
  cout<<"  p   Numerical      Exact          Error \n";
  for (p=2;p<10;p++) {
    globalp=p*1.0;
    res2=(DP)(p/(p-1.0));
    result=NR::qromo(ff,X1,X2,NR::midsql);
    cout<<setw(2)<<p<<setw(12)<<result;
    cout<<setw(12)<<res2<<setw(14)<<result-res2<<endl;
  }
  cout<<"\nImproper integrals:\n\n";
  cout<<"\n int_1^{infty} x^{-p} dx = 1/(p-1): \n \n";
  cout<<"  p   Numerical      Exact           Error \n";
  for (p=2;p<10;p++) {
    globalp=1.0/p;
    res2=(DP)(1.0/(p-1.0));
    result=NR::qromo(ff,X2,X3,NR::midinf);
    cout<<setw(2)<<p<<setw(12)<<result;
    cout<<setw(12)<<res2<<setw(14)<<result-res2<<endl;
  }
  return 0;
}
// FILE: myqromo.cpp ends

Improper integrals:
 int_0^1 x^{-1/p} dx = p/(p-1):

  p   Numerical      Exact          Error
 2           2           2              0
 3         1.5         1.5    2.24537e-06
 4     1.33334     1.33333    2.76962e-06
```

```
 5        1.25        1.25   1.16561e-06
 6         1.2         1.2   3.88171e-06
 7     1.16667     1.16667   2.53182e-06
 8     1.14286     1.14286    1.7985e-06
 9       1.125       1.125   1.35669e-06

Improper integrals:


 int_1^{infty} x^{-p} dx = 1/(p-1):

  p   Numerical      Exact           Error
 2      0.9999           1        -1e-04
 3         0.5         0.5        -5e-09
 4    0.333333    0.333333  -3.33344e-13
 5        0.25        0.25   5.55112e-17
 6         0.2         0.2   5.55112e-17
 7    0.166667    0.166667   5.55112e-17
 8    0.142857    0.142857   8.32667e-17
 9       0.125       0.125   8.32667e-17
```

Esimerkkejä epäoleellisista integraaleista ovat $\int_{-\infty}^{-1} \frac{dx}{x^2}$, $\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}}$. Nämä tapaukset voidaan käsitellä em. ohjelmien mukautetuilla versioilla. Näihin tapauksiin liittyviä apuohjelmia ovat `NR::midpnt, midinf, midsql, midsqu` ja `NR::midexp`.

`NR::midsql` (`NR::midsqu`) soveltuu käytettäväksi yhdessä `NR::qromo`:n kanssa tilanteissa, joissa integraalilla on integroituva singulariteetti alarajalla (ylärajalla), kuten seuraavissa tapauksissa:

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x}} \quad \left(\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x}}\right).$$

Edellä ohjelmassa `myqromo.c` annettiin esimerkki aliohjelmaparin `NR::qromo, midsql` yhteistoiminnasta. Vastaavasti voidaan käsitellä tilanne, jossa sekä ylä- että alarajalla on singulariteetti.

Esim.

$$\int_0^1 \frac{dx}{\sqrt{x(1-x)}} \approx \int_s^{0.5} + \int_{0.5}^{1-s} = I_1 + I_2,$$

missä s on sopiva pieni positiivinen luku. Edelleen

$I_1 =$ `NR::qromo(f,s, 0.5,midsql)`,

$I_2 =$ `NR::qromo(f, 0.5,1.0-s,midsqu)`

Monipuolinen kokoelma kvadratuurikaavoja on esim. teoksessa Abramowitz-Stegun [AS], luku 25.

4.4. Gaussin kvadratuuri Vektoriavaruuksien teoriasta tuttu ortogonaalisuuden käsite voidaan yleistää eri tavoin. Perehdymme nyt erääseen tällaiseen numeriikan kannalta varsin hyödylliseen yleistykseen, jossa vektoriavaruuden muodostavat välillä $[a, b]$ määritellyt jatkuvat funktiot. Olkoot f ja g tällaisia funktioita ja W jokin kolmas funktio, jota kutsutaan *painofunktioksi.* Siinä tapauksessa, että em. funktiot ovat riittävän säännöllisiä (jolloin ko. integraalit ovat hyvin määriteltyjä; tavallisesti $W(x) > 0 \quad \forall x \in [a, b]$ ja jatkuva), määrittelemme funktioiden f ja g *sisätulon* kaavalla

$$\langle f|g\rangle \equiv \int_a^b W(x)f(x)g(x)dx.$$

Funktiot f ja g ovat *ortogonaalisia,* jos niiden sisätulo on 0. Funktiota, jonka sisätulo itsensä kanssa on 1 sanotaan *normitetuksi.* Jos normitetun funktiojoukon funktiot ovat ortogonaalisia keskenään, joukkoa sanotaan *ortonormaaliksi.*

Voimme konstruoida ortonormitetun joukon polynomeja, jossa on täsmälleen yksi polynomi $p_j(x)$ kutakin astetta $j = 0, 1, 2, 3, ...$ Rekursiivinen konstruktio etenee seuraavasti. Asetetaan

$$p_{-1}(x) \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1,$$

$$p_{j+1}(x) = (x - a_j)p_j(x) - b_j p_{j-1}(x), \ j = 0, 1, 2, ...,$$

missä

$$a_j = \frac{\langle xp_j|p_j\rangle}{\langle p_j|p_j\rangle}, j = 0, 1, 2, ..., \ b_j = \frac{\langle p_j|p_j\rangle}{\langle p_{j-1}|p_{j-1}\rangle}, j = 1, 2, 3, ...$$

Kerroin b_0 asetetaan mielivaltaisesti; valitsemme sen nollaksi.

Ortogonaalisilla polynomeilla on tärkeitä sovelluksia mm. numeeriseen integrointiin. Integraalin

$$\int_a^b W(x)f(x)dx \approx \sum_{j=1}^{N} w_j f(x_j)$$

approksimoinnissa voidaan abskissat x_j ja painot w_j valita niin, että kaava pätee yhtälönä kaikille enintään astetta $(2N-1)$ oleville polynomeille. Tämä johtuu siitä, että kaavassa on $2N$ parametria, nimittäin painot w_j ja abskissat x_j.

Kirjamme esittelee sivulla 151 useita numeerisen integroinnin yhteydessä esiintyviä ortogonaalisia polynomeja. Mainittakoon näistä *Gaussin-Legendren polynomi:*

$$W(x) = 1, -1 < x < 1, (j+1)P_{j+1} = (2j+1)xP_j - jP_{j-1}.$$

Algoritmi `NR::gauleg` nojautuu tämän integrointipolynomin käyttöön.

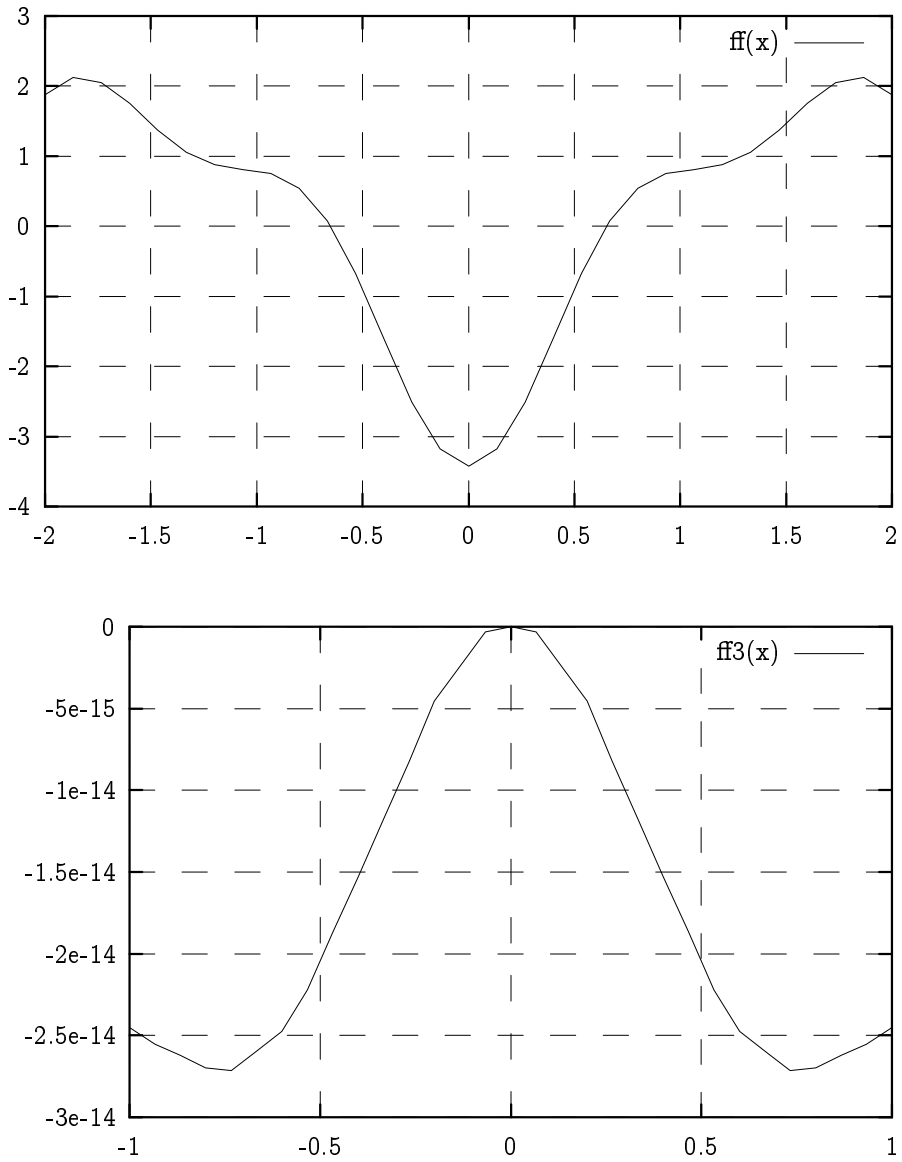
Gaussin kvadratuurikaavat pohjautuvat ortogonaalisiin polynomeihin. Mm. pisteet x_j valitaan tarkoitukseen parhaiten sopivalla tavalla ja mahdollisesti ei-tasavälisesti. Jakopisteet x_j määräytyvät ortogonaalipolynomien ominaisuuksista. Etuna on se, että saadaan lisää vapausasteita ja tarkkuutta.

Seuraava ohjelma tarkastelee algoritmin `NR::gauleg` mukaista numeerista integrointia. Algoritmin osana on pisteiden x_j paikallistaminen Gaussin kvadratuurin mukaisesti. Sovellamme algoritmia tapaukseen, missä integrandina on funktio $\sum_{j=1}^{M} a[j] * \sin(b[j] * x)$ ja missä a ja b ovat satunnaisvektoreita. Tarkkuusarviota varten taulukoimme virhefunktion `ff3(x)`, joka ilmoittaa eksaktin integraalin ja numeerisen integraalin välisen erotuksen integroinnin ylärajan funktiona, kun integrointivälinä on $[0, x]$.

```
// FILE: mygleg.cpp begins
// Integrand is  \sum_{j=1}^M a[j]*sin(b[j]*x)
// with a and b random numbers and exact integral
// \sum_{j=1}^M -(a[j]/b[j])*cos(b[j]*x)
/*  g++ mygleg.cpp -L../lib -I../utils -I../democpp02
-I../gnuplot02 -o a -lm -lnr
```

```
 */

#include <cmath>
#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>

#define PRINT 1
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "gnuplt1.h"
#include "matutl02.h"


#define NPOINT 10
#define MTERM 10
#define X1 0.0
#define X2 1.0
#define X3 5.0

//  X1, X3 are the lower, upper bounds of integration

double a[MTERM], b[MTERM];  // MTERM is an upper bound for M
int M;                      // M is the number of sine terms

double myfunc(double x)
// myfunc gives the values of the sine sums
{
  double s=0.0;
  for (int j=0;j<M; j++) s+=a[j]*sin(b[j]*x);
  return s;
}

double myfunc2(double x)
// myfunc2 gives the integral function of myfunc
{
  double s=0.0;
  for (int j=0;j<M; j++) s+=a[j]*cos(b[j]*x)/b[j];
  return -s;
}
```

```
double ff3(double r)
// This is the error in the gauleg algorithm for
//   numerical integration of myfunc
{
  double a=0.0,b=r,c=0.0;
  Vec_DP x(NPOINT),w(NPOINT);
  NR::gauleg(a,b,x,w);
  for (int i=0;i<NPOINT;i++) c+=(w[i]*myfunc(x[i]));
  return c - ( -myfunc2(a)+myfunc2(b));
}

int main()
{
  double xx=0.0, zz;
  Vec_DP x(NPOINT),w(NPOINT);
// Generate random coefficients
  for (int i=0;i<MTERM;i++) {a[i]=0.0; b[i]=0.0;}
  M=(4<MTERM)? 4:MTERM ;  // M must be smaller than MTERM
  init_srand();
  for (int i =0;i<M;i++)
  { // rdm is from matutl
    a[i]=rdm(0.2,3.0);
    b[i]=rdm(0.5,6.0) ;
  }
  cout<<"\na  = ";
  for (int i =0;i<M;i++) cout<<setw(14)<<a[i];
  cout<<"\nb  = ";
  for (int i =0;i<M;i++) cout<<setw(14)<<b[i];
  NR::gauleg(X1,X3,x,w);
  for (int i=0;i<NPOINT;i++)    xx+=(w[i]*myfunc(x[i]));
  cout<<"\nIntegral from GAULEG: "<<xx<<endl;
  zz= -myfunc2(X1)+myfunc2(X3);
  cout<<"Actual value: "<< zz<<endl;
  cout<<"Error = "<< zz-xx<<endl;
  gnuplt1(myfunc2,"ff(x)",0, NULL);
  gnuplt1(ff3,"ff3(x)",0, NULL);
  return 0;
}
// FILE: mygleg.cpp ends
```



Ylempi kuva esittää integroitavaa funktiota ja alempi algoritmin `NR::gauleg` avulla tapahtuvan numeerisen integroinnin virhettä ylärajan funktiona, kun integrointi tehdään yli välin $[0, x]$. Virhe voidaan laskea koska integrointi palautuu trigonometrisiin funktioihin.

5 FUNKTIOIDEN APPROKSIMOINTI

Kaksi erilaista, mutta matemaattisesti identtistä funktioiden laskutapaa voivat numeerisilta ominaisuuksiltaan olla täysin erilaisia (pyöristysvirheiden vaikutus, epästabiilit menetelmät). Tunnetun matemaattisen identiteetin nojalla $\cos(x)$ ja $\sqrt{1-\sin^2(x)}$ ovat samoja, kun $x \in (0, \pi/2)$, mutta ei ole takeita siitä, että tietokoneitse laskettaessa niille saataisiin täsmälleen samat arvot. Vastauksissa todennäköisesti esiintyy pyöristysvirheen suuruusluokkaa olevia eroja, kuten olemme Luvussa 1 nähneet.

Funktioiden arvojen laskemiseen käytetään useita erilaisia approksimointeja, joista NR esittää katsauksen Luvussa 5. Tuttu Taylorin sarja on yleensä numeerisiin tarkoituksiin huono. Jos Taylorin sarjasta käytetään p ensimmäistä termiä funktion $exp(-x)$ arvojen laskemiseen pisteessä $x = -5$, ovat tulokset surkeita, jos $p \leq 10$. Parempia vaihtoehtoja ovat esimerkiksi muut polynomi- ja rationaalifunktiokehitelmät, Chebyshevin ja Padén menetelmät.

Trigonometristen funktioiden arvoja laskettaessa voidaan menetellä seuraavasti. Ensin johdetaan jollakin välillä, esim. $[-1, 1]$ pätevä approksimaatio, jonka virheelle tiedetään arvio. Senjälkeen palautetaan yleinen tapaus muunnoskaavojen avulla tähän tapaukseen.

Polynomin arvon määritystä ei pidä tehdä näin:

```
p=c[1]+c[2]*x+c[3]*pow(x,2)+c[4]*pow(x,3)+c[5]*pow(x,4);
```

vaan ns. *Hornerin kaavan* mukaisesti:

```
p=c[n];
for (j=1;j <= n-1;j++) p=p*x+c[n-j];
```

Myös polynomin derivaatta voidaan laskea samaan tapaan.

Olemme toistaiseksi tarkastelleet reaalisen lukualueen matriiseja vektoreita jne. Vastaavat tarkastelut voidaan ulottaa myös

kompleksiseen tapaukseen tarkastelemalla näitä reaalilukujen pareina. Koska C-kieli ei tue kompleksilukujen käyttöä (C++ tukee), on käyttäjän implementoitava kompleksilukujen aritmeettiset operaatiot, kuten yhteenlasku, kertominen, juurenotto jne. NR esittää sivuilla 948-950 kompleksilukujen aritmeettisiin operaatioihin soveltuvia algoritmeja C-kielessä. Seuraava C++-ohjelma valottaa algoritmien käyttöä ja antaa arvion NR:n kompleksilaskutoimitusten tarkkuudesta.

Palautamme mieleen luvusta 1, että hypergeometrinen sarja määritellään kaavalla

$$ {}_2F_1(a,b;c;z) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a,n)(b,n)}{(c,n)n!} z^n, $$

missä $(a,0) = 1, (a,n+1) = (a,n)(a+n)$. Kirjamme esittää sivuilla 272-273 algoritmin funktion laskemiseksi. Seuraava ohjelma osoittaa oikeaksi identiteetin $F(\pi/2, \sqrt{k}) = (\pi/2)F(1/2, 1/2, 1, k)$, missä

$$ F(\pi/2, k) \equiv \int_0^{\phi} \frac{d\theta}{\sqrt{1 - k^2 sin^2\theta}}. $$

```
// FILE: myhypser2.cpp begins
//  g++ myhypser2.cpp -L../lib -I../utils -o a -lm -lnr

#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
#include <complex>
#include "nr.h"
using namespace std;

// Driver for routine hypser

DP ff2(DP x)
{
  DP xx= x, y=NR::ellf(0.5*M_PI,xx);
  return y;
}

int main()
{
  int p;
```

```
  DP x,r,s,kk;
  complex<DP> a(0.5,0.0),b(0.5,0.0),c(1.0,0.0);
  complex<DP> z,series,deriv;

  cout<<" a= 1/2, b=1/2, c =1 \n";
  cout<<"    k         F(a,b;c;k)    (2/PI)*F(PI/2,sqrt(k))   Error\n";
  for (p=1;p<=9; p++) {
    x=((DP)p)*0.1;
    z=complex<DP>(x,0.0);
    NR::hypser(a,b,c,z,series,deriv);
    r=series.real(); s=series.imag();
    kk=(2/M_PI)*((ff2(pow(x, 0.5))));
    cout<<setw(7)<<x<<setw(14)<<series.real();
    cout<<setw(20)<<kk<<setw(20)<<fabs(r-kk)<<endl;
  }
  cout<<"This seems to show that F(PI/2,sqrt(k))=(PI/2) F(1/2,1/2,1,k)\n";
  cout<<"which  holds by AS, 17.3.9.\n";
  return 0;
}
// FILE: myhypser2.cpp ends
```

```
 a= 1/2, b=1/2, c =1
    k         F(a,b;c;k)    (2/PI)*F(PI/2,sqrt(k))   Error
    0.1       1.02651             1.02651         4.44089e-16
    0.2       1.05655             1.05655                   0
    0.3        1.0911              1.0911         4.44089e-16
    0.4        1.1316              1.1316         2.22045e-16
    0.5       1.18034             1.18034         1.11022e-15
    0.6       1.24113             1.24113         2.22045e-16
    0.7       1.32122             1.32122         4.44089e-16
    0.8       1.43698             1.43698         2.22045e-16
    0.9       1.64126             1.64126         4.44089e-16
This seems to show that F(PI/2,sqrt(k))=(PI/2) F(1/2,1/2,1,k)
which  holds by AS, 17.3.9.
```

Chebyshevin approksimointi

Astetta n oleva Chebyshevin polynomi $T_n(x)$ määritellään kaavalla

$$T_n(x) \equiv \cos(n \text{ arc } \cos(x)),\ x \in [-1, 1].$$

Silloin

$$T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x,\ T_2(x) = 2x^2 - 1,$$
$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x), n \geq 1.$$

Chebyshevin polynomit ovat ortogonaalisia:

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_i(x)T_j(x)}{\sqrt{1-x^2}} = \begin{cases} 0, i \neq j, \\ \pi/2, i = j \neq 0, \\ \pi, i = j = 0. \end{cases}$$

Approksimointi Chebyshevin polynomeilla perustuu seuraavaan lauseeseen.

Lause. Olkoon f välillä $[-1, 1]$ määritelty jatkuva funktio ja kertoimet $c_j, j = 0, 1, 2, ..., N-1$, määritelty seuraavasti

$$c_j = \frac{2}{N} \sum_{k=1}^{N} f(x_k)T_j(x_k), \quad x_k = \cos\Big(\frac{\pi(k-\frac{1}{2})}{N}\Big).$$

Silloin kaava

$$f(x) \approx -\frac{c_0}{2} + \sum_{k=0}^{N-1} c_k T_k(x)$$

pätee yhtälönä, kaikissa $T_N(x)$:n nollakohdissa $x_k, k = 1, 2, ..., N$.

Eräs Chebyshevin polynomien etu on kertoimien c_k nopea pieneneminen. Jos yo. approksimaation asemasta käytetäänkin osasummaa, jossa ylärajana on $m \leq N$, niin muodostuva ero on enintään $\sum_{k=m+1}^{N} |c_k|$, koska $|T_n(x)| \leq 1$.

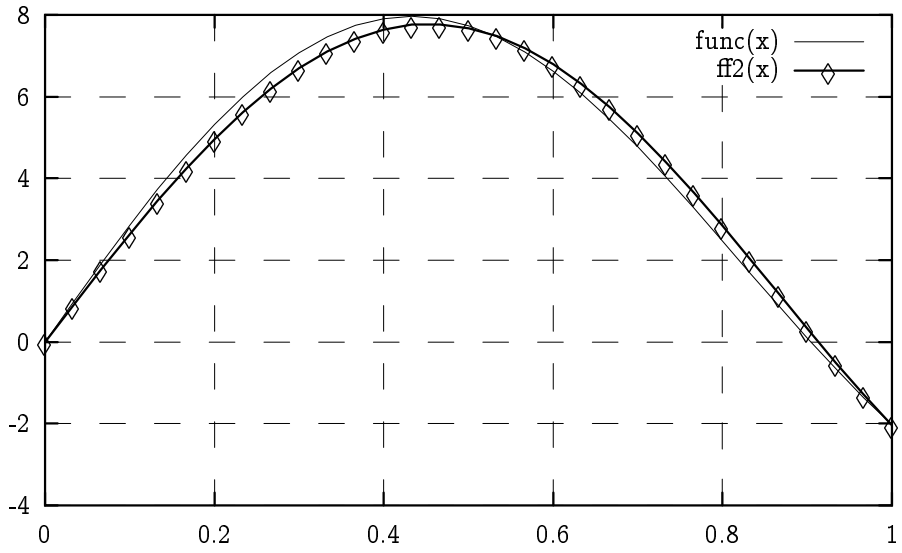
Seuraava ohjelma antaa esimerkin *Chebyshevin approksimaation* käytöstä. Esimerkkifunktiona on samankaltainen funktio kuin Luvun 4 lopussa tarkastellussa esimerkissä. Ohjelma generoi testifunktiolle Chebyshevin approksimaation ja piirtää kuvan alkuperäisestä funktiosta ja approksimaatiosta.

```
/* FILE: mychebft.cpp begin                                  */
// Plots a function and its Chebyshev approximation
// g++ mychebft.cpp -L../lib -I../utils -I../democpp02 -I../gnuplot02 -o a -m -lnr
/* Modified from driver for routine chebft */
```

```
#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#define PRINT 1

#include "gnuplt1.h"

#define NVAL 40
#define PIO2 (0.5*M_PI)
#define MTERM 15

Vec_DP ccoef(NVAL), acoef(MTERM), bcoef(MTERM);
int M, mval; /* M is the number of sine terms */

double func(double x)
/* myfunc gives the values of the sine sums */
{
  float s=0.0; int j;
  for (j=1;j<=M; j++)
    s+=acoef[j]*sin(bcoef[j]*x);
  return s;
}

double ff2(double xx)
{
  DP f= NR::chebev((-PIO2),PIO2,ccoef, mval, xx);
  return  f;
}

int main()
{
  double a=(-PIO2),b=PIO2,f, x;
  int i;
  init_srand();
  M=5; /* Generate random coefficients; M<MVAL */
  for (i=0;i<=M-1;i++) { /* rdm is from matutl02.cpp */
    acoef[i]=rdm(0.5,5.0);
    bcoef[i]=rdm(-0.5,5.0) ;};
```

```
  printf("\na  = ");
  for (i =0;i<=M-1;i++) {printf(" %8.5f", acoef[i]);};
  printf("\nb  = ");
  for (i =0;i<=M-1;i++) {printf(" %8.5f", bcoef[i]);};
  Vec_DP c(NVAL);
  NR::chebft(a,b,c,func);
  for (i=0 ;i<=NVAL-1;i++)
    {
      if (fabs(c[i]) > 1e-9) printf("\nc[ %2d] =  %12.5e \n",i, c[i]);
      ccoef[i]=c[i];
    }
  cout<<"\nFunction depends on "<<2*M<<" parameters\n";
  /* test result */
  printf("\nHow many terms in Chebyshev evaluation?\n");
  printf("Enter n between 6 and %2d. (n=0 to end).\n",NVAL);
  scanf("%d",&mval);
  printf("You entered: %2d\n",mval);
  if ((mval<2)||(mval>NVAL-1)) abort();
  Vec_DP c2(mval);
  for (i=0 ;i<=mval-1;i++) {
    c2[i]=   ccoef[i]; }
  printf("\n%9s %14s %16s\n","x","actual","Chebyshev fit");
  for (i=-8;i<=8;i++) {
    x=i*PIO2/10.0;
    f=NR::chebev(a,b,c2,mval,x);
    printf("%12.6f %12.6f %12.6f \n",x,func(x),f);
  }
  gnuplt1(func,"func(x)",0,ff2,"ff2(x)",2,NULL);
  return 0;
}
/* FILE: mychebft.cpp end                                    */


a  =   1.45756  4.89216  2.31717  1.39905  2.39889
b  =   4.52844  3.69437  2.09250  4.54659 -0.03627
c[  1] =  -2.02306e+00
c[  3] =  -2.79034e+00
c[  5] =   4.63701e+00
c[  7] =  -1.80785e+00
c[  9] =   3.50729e-01
c[ 11] =  -4.24137e-02
c[ 13] =   3.57098e-03
c[ 15] =  -2.23239e-04
c[ 17] =   1.07587e-05
c[ 19] =  -3.26085e-07
```

```
c[ 21] =  -5.11194e-08

.....

c[ 37] =   2.88002e-08
c[ 39] =  -9.61879e-09

Function depends on 10 parameters

How many terms in Chebyshev evaluation?
Enter n between 6 and 40. (n=0 to end).
8
You entered:  8

        x          actual    Chebyshev fit
   -1.256637     4.608825     4.886785
   -1.099557     3.604818     3.860278
   -0.942478     0.854915     0.722675
   -0.785398    -2.823468    -3.193391
   -0.628319    -6.158212    -6.389697
```



Padén approksimointi

Astetta N oleva rationaalifunktio on lauseke

$$R(x) = \frac{p(x)}{q(x)},$$

missä p ja q ovat polynomeja, joiden astelukujen summa $= N$. Erikoistapauksena $q(x) \equiv 1$ saadaan polynomit. Näinollen on selvää, että astetta N olevalla rationaalifunktioapproksimoinnilla saavutetaan suurempi tarkkuus kuin samaa astetta olevalla polynomiapproksimaatiolla. Lisäetuna rationaalifunktioilla on, että niitä voidaan käyttää myös approksimoitaessa funktioita, joilla on singulariteetti (eli äärettömyyspiste) lähellä approksimointiväliä, mutta kuitenkin välin ulkopuolella.

Lähtökohtana approksimaatiolle

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k \approx \frac{\sum_{k=0}^{M} a_k x^k}{1 + \sum_{k=1}^{N} b_k x^k} \equiv R(x) = \frac{p(x)}{q(x)}$$

ovat vaatimukset

$$R(0) = f(0), \frac{d^{(k)} f(x)}{dx^{(k)}} = \left. \frac{d^{(k)} R(x)}{dx^{(k)}} \right|_{x=0}, k = 1, \ldots, M + N.$$

Laventamalla edellinen yhtälö kertomalla puolittain oikeanpuolen nimittäjällä, ja siirtämällä sopivasti termejä saamme lausekkeen

$$f(x)q(x) - p(x).$$

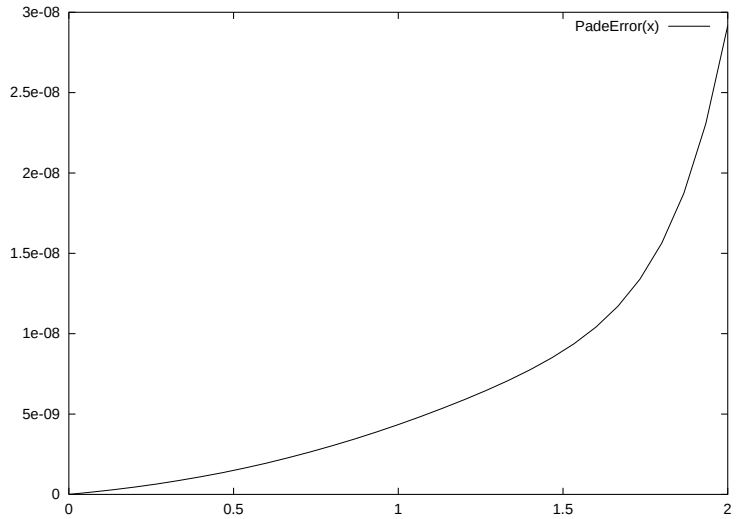
Vaatimalla, että lausekkeen sarjakehitelmästä häviävät kaikki astetta $\leq M + N$ olevat termit, saadaan rekursiivinen ehto kertoimien määritykselle. Muodostuva lineaarinen yhtälöryhmä voidaan ratkaista Luvun 2 menetelmin. Padé-approksimointi on MacLaurin-kehitelmän yleistys.

Algoritmi `NR::pade` (s. 202) antaa Padé-approksimoinnin, jossa $M = N$.

```
// FILE: mypade.cpp begins
//  g++ mypade.cpp -L../lib -I../utils  -o a -lm -lnr
// This program computes Pade approximation for
// 2^x in terms of p(x)/q(x) where both p and q
//   are polynomials of degree n.

#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
```

```
#include "nr.h"
using namespace std;


int main(void)
{
  int j,k,n;
  DP resid,b,d,fac,x;

  for (;;) {
    cout << "Enter n for PADE routine (or 0 to stop):  ";
    cin >> n;
    cout << endl;
    if (n < 1) break;
    Vec_DP c(2*n+1),cc(2*n+1);
    fac=1;
    for (j=0;j<2*n+1;j++) {
      c[j]=1.0/fac;
      cc[j]=c[j];
      fac =(fac/log(2.0))*((double)j+1.0);
    }
    NR::pade(c,resid);
    cout << "Norm of residual vector= " << scientific;
    cout << setw(8) << resid << endl;
    cout << setw(14) << "point" << setw(19) << "func. value";
    cout << setw(16) << "pade series" << setw(16) << "power series";
    cout << setw(16) << "pade-func" << endl;
    cout << fixed << setprecision(8);
    for (j=0;j<21;j++) {
      x=j*0.25;
      for (b=0.0,k=2*n;k>=0;k--) {
        b *= x;
        b += cc[k];
      }
      d=NR::ratval(x,c,n,n);
      cout << setw(8) << x << setw(12) << pow(2.0,x);
      cout << setw(16) << d << setw(16) << b;
      cout << setw(15) << pow(2.0,x)-d << endl;
    }
    cout << endl;
  }
  return 0;
}
// FILE: mypade.cpp ends
```

```
Enter n for PADE routine (or 0 to stop):  6

Norm of residual vector= 5.7246106e-17
  point   func. value     pade series    power series     pade-func
      0           1              1              1              0
   0.25   1.1892071      1.1892071      1.1892071  -2.220446e-16
    0.5   1.4142136      1.4142136      1.4142136   2.220446e-16
   0.75   1.6817928      1.6817928      1.6817928              0
      1           2              2              2  3.1086245e-15
   1.25   2.3784142      2.3784142      2.3784142  6.5281114e-14
    1.5   2.8284271      2.8284271      2.8284271  8.3311136e-13
   1.75   3.3635857      3.3635857      3.3635857  7.4069639e-12
      2           4              4              4  5.0424109e-11
   2.25   4.7568285      4.7568285      4.7568284  2.8004532e-10
    2.5   5.6568542      5.6568542       5.656854  1.3249197e-09
   2.75   6.7271713      6.7271713      6.7271705  5.5069762e-09
      3           8              8      7.9999974  2.0572496e-08
   3.25   9.5136569      9.5136568      9.5136496  7.0277862e-08
    3.5   11.313708      11.313708      11.313689  2.2250681e-07
   3.75   13.454343      13.454342      13.454294  6.5991298e-07
```



Padé-approksimointi on yo. esimerkissä yllättävän tarkka. Chebyshevin approksimoinnissa saadaan aikaan jollakin välillä hyvä tarkkuus, kun taas Padé-approksimoinnissa tarkuusalueesta ei voida sanoa juuri mitään.

6 ERIKOISFUNKTIOT

Usein esiintyvää tai muuten hyödyllistä funktiota sanotaan erikoisfunktioksi. Näiden funktioiden merkitys ja erityisyys on siinä, että ne mahdollistavat monissa sovelluksissa esiintyvien ääriarvotehtävien ratkaisemisen analyyttisessa muodossa. Suuri osa erikoisfunktioista toteuttaa jonkin toisen kertaluvun differentiaaliyhtälön. Matemaattinen fysiikka ja kombinatoriikka ovat tieteenaloja, joissa erikoisfunktioita tavantakaa käytetään.

Toisinaan erikoisfunktiot jaetaan ns. alkeisfunktioihin ja korkeampiin transkendenttifunktioihin. Esimerkkejä alkeisfunktioista ovat polynomit, trigonometriset funktiot, hyperboliset funktiot ja eksponenttifunktiot sekä näiden käänteisfunktiot.

Korkeampiin transkendenttifunktioihin kuuluvat Eulerin Γ-funktio, useat todennäköisyyslaskennan funktiot, Besselin funktiot, elliptiset integraalit ja elliptiset funktiot sekä Gaussin hypergeometrinen funktio. Erikoisfunktioiden määrittelyalue on tavallisesti jokin kompleksitason osa-alue. Ohjelmakirjastot tarjoavat vaihtelevan kokoelman algoritmeja erikoisfunktioille: vaihtelua esiintyy erityisesti algoritmien pätevyysalueen ja virherajojen suhteen.

Kansainvälisesti merkittävimpiä perusteoksia erikoisfunktioiden alalla on [AS], joka on myös erittäin hyödyllinen hakuteos numeriikan alalla. Se lienee eniten siteerattuja matematiikan käsikirjoja.

6.1. Gamma-funktio. Γ-funktiolle on useita ekvivalentteja esityksiä. Tavallisin näistä on Eulerin integraali

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty t^{z-1} e^{-t} dt, \;\; Re\{z\} > 0.$$

Funktion määrittelyaluetta voidaan laajentaa käyttäen iteratiivisesti kaavaa

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z).$$

Kaavan avulla gammafunktion määrittelyjoukko voidaan laajentaa joukoksi $\mathbb{C} \setminus \{0, -1, -2, ...\}$. Poikkeuspisteissä funktiolla on napa eli

äärettömyyspiste, katso alempana olevaa kuvaa $Re\Gamma(z)$:sta. Eräitä perusominaisuuksia on se, että $\Gamma(z)$ on kertomafunktion yleistys:

$$\Gamma(n+1) = n!,\ n = 1, 2, 3, ..., \Gamma(1) = \Gamma(2) = 1.$$

Silloin pätee kehitelmä

$$\Gamma(z+1) = (z+\gamma+\frac{1}{2})^{z+\frac{1}{2}} e^{-(z+\gamma+\frac{1}{2})} \sqrt{2\pi}[C_0 + \frac{C_1}{z+1} + ... + \frac{C_N}{z+N} + \epsilon].$$

Huomioiden yo. monimutkaisen määritelmän, on seuraava tieto melko yllättävä, nimittäin, että jos $\gamma = 5,\ N = 6$, niin on olemassa sopivat vakiot $C_0, .., C_6$, joille virhetermille pätee $|\epsilon| < 2 \cdot 10^{-10}$ (alueessa $\mathrm{Re}\, z > 0$).

NR tarjoaa algoritmeja seuraaville funktioille, jotka ovat läheisessä yhteydessä Γ-funktioon:

`NR::gammln(x), x > 0`, laskee $\log \Gamma(x)$:n arvoja

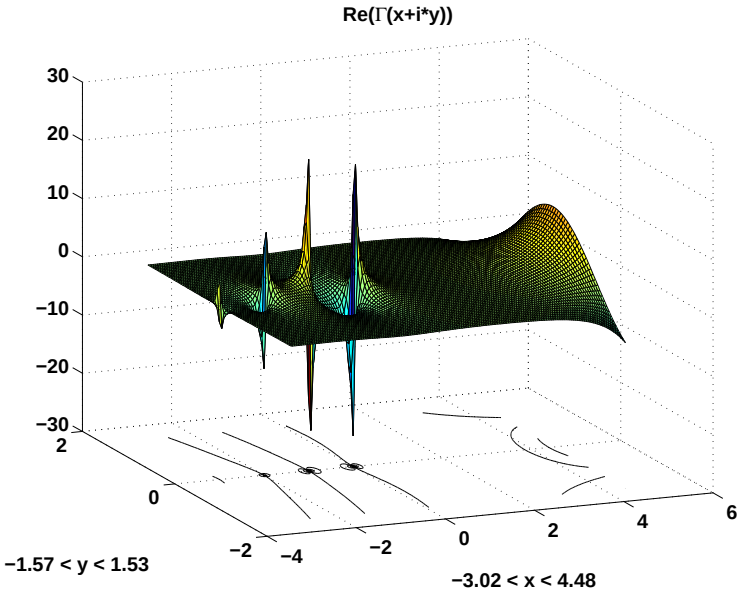
`NR::factrl(n)` laskee $n!$:n arvoja

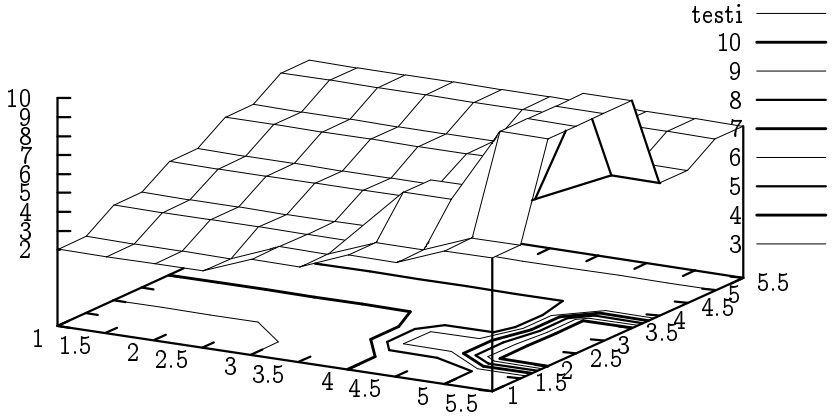
`NR::bico(N,K)`, laskee $\binom{N}{K}$:n arvoja

`NR::beta(p,q)` laskee $B(p,q) = \frac{\Gamma(p)\Gamma(q)}{\Gamma(p+q)}$:n arvoja.

```
// FILE: mybico2.cpp begins
// Driver for routine bico

#include <cmath>

#define SCALE 1
#define PRINT 1

#include "nr.h"
#include "gnusurf.h"


double f(double x,double y)
{
```

```
  int n=(int)floor(x), p=(int)floor(y);
  if (n<=p) n=p+1;
  return NR::bico(n,p);
}

int main()
{
  int k,n,sum;
  double xx[]={1.,6.},yy[]={1.,6.};
  cout<<"Pascal triangle (and row sum):"<<endl;
  for (n=1;n<=8; n++)
  {
    sum=0;
    for (k=0;k<=n;k++)
    {
      sum+=(int)NR::bico(n,k);
      cout<<" "<<NR::bico(n,k) <<" ";
      if (k==n) cout << "  ( "<<sum<<" )\n";
    }
  }
  gnusurf(f,xx,yy,SCALE,0,"bico(x,y)","testi");
  return 0;
}
// FILE: mybico2.cpp ends

[vuorinen@mat-148]~/nrcpp02/democpp02 ./a
Pascal triangle (and row sum):
 1  1   ( 2 )
 1  2  1   ( 4 )
 1  3  3  1   ( 8 )
 1  4  6  4  1   ( 16 )
 1  5  10  10  5  1   ( 32 )
 1  6  15  20  15  6  1   ( 64 )
 1  7  21  35  35  21  7  1   ( 128 )
 1  8  28  56  70  56  28  8  1   ( 256 )
```





NR:ssä on implementoitu mm. seuraavia funktioita:

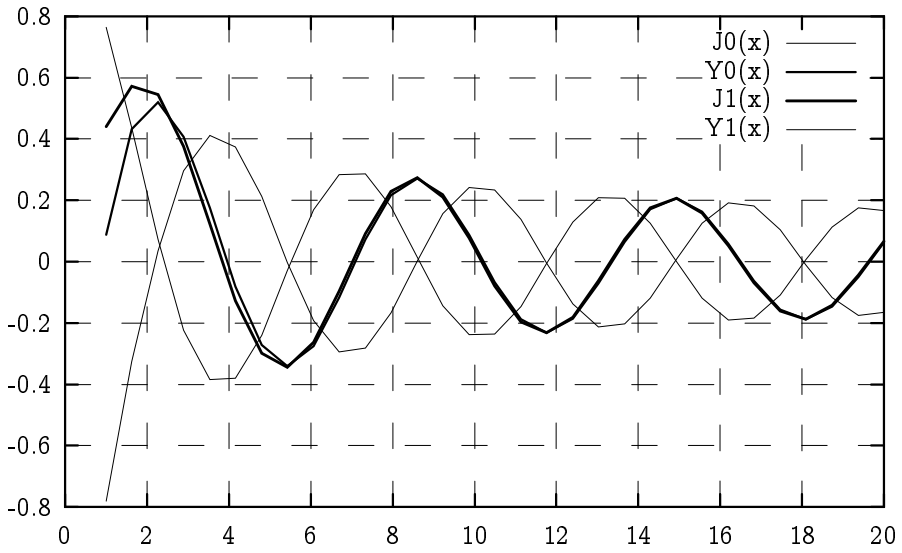
- Epätäydellinen gamma-funktio: `NR::gammp(A,X)`

$$P(a,x) = \frac{\gamma(a,x)}{\Gamma(a)} = \frac{1}{\Gamma(a)} \int_0^x e^{-t} t^{a-1} dt \ (a > 0).$$

- Virhefunktio $\mathrm{erf(x)} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$ ja muita todennäköisyyslaskennan funktioita.
- Besselin funktiot $J_\nu(z) = (\frac{1}{2}z)^\nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-\frac{1}{4}z^2)^k}{k!\Gamma(\gamma+k+1)}$, $\nu, \gamma \in \mathbb{R}$ (ks. kuva 6.5.1/NR s.231).

```
// FILE: mybess.cpp begins
// Bessel functions

#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include "nr.h"
#define PRINT 1
#include "gnuplt1.h"

using namespace std;
double ff1(double x)
{
  return NR::bessj0(x);
}

double ff2(double x)
{
  return NR::bessy0(x);
}

double ff3(double x)
{
  return NR::bessj1(x);
}

double ff4(double x)
{
  return NR::bessy1(x); // for positive x
}

int main()
{
  int p;
  double x,a,b,c,d;
  cout<<"   x          J0(x)      Y0(x)      J1(x)      Y1(x) \n";
  for (p=1;p<=9; p++)
  {
    x=((double)p)*1.0;
    a= NR::bessj0(x);
    b= NR::bessy0(x);
    c= NR::bessj1(x);
    d= NR::bessy1(x);
    cout<<setw(12)<<x<<setw(12)<<a<<setw(12)<<b;
    cout<<setw(12)<<c<<setw(12)<<d<<endl;
```

```
  }
  gnuplt1(ff1,"J0(x)",13,ff2,"Y0(x)",13,ff3,"J1(x)",\
  13,ff4,"Y1(x)",13,NULL);
  return 0;
}
// FILE: mybess.cpp ends
```



6.2. Elliptiset integraalit. Monet mekaniikan ja tähtitieteen ongelmat johtivat 1700- ja 1800-luvuilla integraaleihin, joita ei voitu ilmaista alkeisfunktioiden avulla. Näin johduttiin uusiin funktioluokkiin mm. elliptisiin integraaleihin, joiden asema asteittain vakiintui ja joilla edelleen on tärkeä asema sähkömagnetiikan kenttälaskuissa. Monet näistä transkendenttifunktioista osoittautuivat niin tarpeellisiksi, että niiden arvot taulukoitiin käsikirjoihin. Nuo 1800-luvulla vuosikausien laskutyön vaatineet taulukot voitaisiin nykyaikana laskea muutamassa sekunnissa.

Esimerkkejä funktioluokista, jotka esiintyvät useissa eri yhteyksissä, ovat Gaussin hypergeometrinen funktio sekä elliptiset integraalit ja elliptiset funktiot. Mainittakoon, että mm. heilurin heilahdusajan kaava voidaan ilmaista elliptisten integraalien avulla, samoin ellipsin kaaren pituus. Elliptisten funktioiden teorian merkittävä kehittäjä oli Legendre, jonka tutkimukset johtivat mm. hänen nimeään kantavien esitysmuotojen löytymiseen.

Legendren ns. *epätäydellisiä elliptisiä integraaleja* ovat

$$E(\phi,k) = \int_0^\phi \sqrt{1-k^2\sin^2\phi}\,d\phi = \int_0^\phi \frac{\sqrt{1-k^2y^2}}{\sqrt{1-y^2}}dy$$

$$F(\phi,k) = \int_0^\phi \frac{d\phi}{\sqrt{1-k^2\sin^2\phi}} = \int_0^y \frac{dy}{\sqrt{(1-y^2)(1-k^2y^2)}} =$$

$$\int_0^x \frac{dx}{\sqrt{(1+x^2)(1+(1-k^2)x^2}},$$

$$y = \sin\phi,\ \ x = \tan\phi,\ \ 0 < k < 1,\ \ 0 < \phi \leq \pi/2\,.$$

Numeerisiin tarkasteluihin soveltuvat edellisiä paremmin ns. *Carlsonin symmetriset integraalit*

$$R_F(x,y,z), R_J(x,y,z,p), R_D(x,y,z), R_C(x,y),$$

1970-luvulta. Kirjamme toisessa painoksessa on Carlsonin algoritmit `NR::rf, rj, rd, rc` näiden laskemiseksi. Monet ohjelmakirjastot käyttävät juuri näitä algoritmeja myös elliptisten integraalien laskemiseen. Tähän tarkoitukseen tarvitaan seuraavat palautuskaavat Legendren integraaleille

$$F(\phi,k) = (\sin\phi)\texttt{NR::rf}(\cos^2\phi, 1-k^2\sin^2\phi, 1)\,,$$

$$E(\phi,k) = (\sin\phi)\texttt{NR::rf}(\cos^2\phi, 1-k^2\sin^2\phi, 1) -$$

$$\frac{1}{3}k^2(\sin^3\phi)\texttt{NR::rd}(\cos^2\phi, 1-k^2\sin^2\phi, 1)\,.$$

Erityisen tärkeitä ovat Legendren *ensimmäisen kertaluvun täydellinen elliptinen integraali*

$$K(k) = F(\frac{\pi}{2},k) = \texttt{rf}(0, 1-k^2, 1),\ k \in [0,1),$$

ja *toisen kertaluvun täydellinen integraali*

$$E(k) = E(\frac{\pi}{2},k) = \texttt{rf}(0, 1-k^2, 1) -$$

$$\frac{1}{3}k^2\texttt{rd}(0, 1-k^2, 1),\ \ k \in [0,1].$$

Gauss (1799) on todistanut, että $K(k)$ voidaan laskea lukujen 1 ja k ns. aritmeettis-geometrisen keskiarvon $\mathrm{a}g(1,k)$ avulla seuraavasti. Asetetaan

$$a_0 = 1,\ b_0 = k,\ a_{n+1} = \frac{1}{2}(a_n + b_n),\ b_{n+1} = \sqrt{a_n b_n},\ n = 0, 1, 2, ...$$

Silloin lukujonojen (a_n) ja (b_n) yhteinen raja-arvo $\mathrm{a}g(1,k)$ toteuttaa Gaussin identiteetin

$$(*) \qquad K(\sqrt{1-k^2}) = \frac{\pi}{2\mathrm{a}g(1,k)}.$$

B. C. Carlsonin töissä 1970-luvulla on Gaussin identiteetin yleistyksiä. Carlsonin algoritmit on otettu elliptisten integraalien numeerisen laskemisen perustaksi useissa ohjelmakirjastoissa, kuten NAG, IMSL ja SLATEC.

Seuraavasta ohjelmasta ilmenee miten em. funktioita käytetään. Tulosten oikeellisuuden tarkistamiseksi ohjelmassa tulostetaan viimeisesssä sarakkeessa testisuure

$$E(k)K(k') + E(k')K(k) - K(k')K(k) - \frac{\pi}{2}; \quad k' = \sqrt{1-k^2},$$

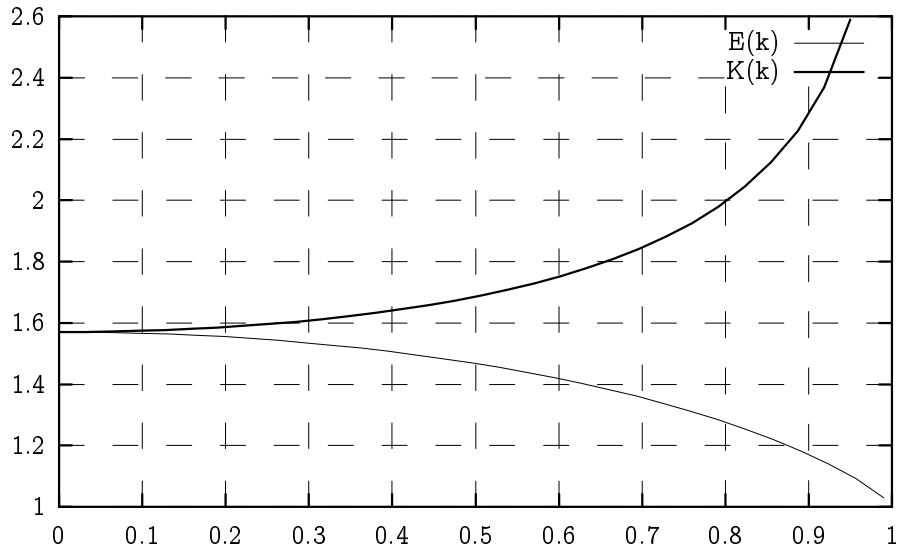
joka on identtisesti nolla *Legendren identiteetin* perusteella.

```
// FILE: myrf.cpp begins
/*  g++ -Wall myrf.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr  */
// This program computes the values of the complete elliptic
// integrals K(k) and E(k). To check the correctness of
// the result, a test quantity is printed (it should vanish by
// Legendre's identity)
#include <cstdlib>
#include <cstdio>
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"

#define PRINT 1
#include "gnuplt1.h"
```

```
double ff1(double x)
{  return NR::elle(0.5*M_PI,x);}

double ff2(double x)
{  return NR::ellf(0.5*M_PI,x);}

double LegId(double &x)
// Legendre's identity says that
//   E K' +E'K -K K' - pi/2 = 0
{
  if (abs(x)>1-1e-10) x=(x/abs(x))*(1-1e-11);
  double E=ff1(x), E1=ff1(pow(1-x*x, 0.5)),
    K=ff2(x), K1=ff2(pow(1-x*x, 0.5));
  return E*K1+E1*K-K*K1-0.5*M_PI;
}

int main()
{
  int p;
  double x,r1,r2;
  cout<<"     k        E(k)       K(k) ";
  cout<<"      Legendre(k) \n";
  for (p=1;p<=9; p++)
  {
    x=p*0.1;
    r1=NR::ellf(0.5*M_PI,x);
    r2=LegId(x);
    cout<<setw(6)<<x<<setw(12)<<NR::elle(M_PI/2,x);
    cout<<setw(12)<<r1<<setw(16)<<r2<<endl;
  }
  gnuplt1(ff1,"E(k)",0,ff2,"K(k)",0,NULL);
  return 0;
}
// FILE: myrf.cpp ends
```

k	E(k)	K(k)	Legendre(k)
0.1	1.56686	1.57475	-9.51496e-16
0.2	1.55497	1.58687	7.5764e-16
0.3	1.53483	1.60805	-7.5287e-16
0.4	1.50594	1.64	4.13732e-16
0.5	1.46746	1.68575	3.49113e-16
0.6	1.41808	1.75075	9.15067e-17
0.7	1.35566	1.84569	-3.5757e-16
0.8	1.27635	1.9953	1.4615e-16

```
0.9      1.1717     2.28055     1.07119e-16
```



Erikoisfunktioiden alalta on laaja kirjallisuus. Eräs arvovaltainen alan esittely on teos G. Andrews, R. Askey, R. Roy: Special Functions, Encyclopedia of Mathematics and its Applications, Vol. 71, Cambridge U. Press, 1999, ISBN 0-521-78988-5. Erikoisfunktioiden numeeriseen laskentaan suuntautuneita ovat seuraavat teokset S. L. Moshier: Methods and Programs for Computing Mathematical Functions, Prentice Hall 1989, W. J. Thompson: Atlas for Computing Mathematical Functions, J. Wiley & Sons 1997, ISBN 0-471-00260-7. D. Lozier ja F. Olver ovat tehneet laajan katsauksen erikoisfunktioiden numeerisiin algoritmeihin, joka löytynee Internetistä,

`http://math.nist.gov/mcsd/Reports/2001/nesf/paper.pdf` .

Hyödyllisiä linkkejä on myös S. Finchin koostamalla Favorite Mathematical Constants www-sivulla

`http://pauillac.inria.fr/algo/bsolve/constant/constant.html` .

7 SATUNNAISLUVUISTA

Tietokoneella voidaan generoida ns. pseudosatunnaislukuja, joita jatkossa hieman epätarkasti kutsumme satunnaisluvuiksi. Oikeista satunnaisluvuista ne eroavat sikäli, että ne ovat täysin determinisesti tuotettuja jollakin satunnaislukugeneraattorilla. Niiden tilastolliset ominaisuudet noudattavat jotakin etukäteen annettua todennäköisyysjakaumaa tai tämä ainakin on tavoitteena. Satunnaislukugeneraattorin laatukriteereitä:

- tehokkuus,
- miten hyvin generoitujen lukujen jakauma vastaa tavoitteena olevaa jakaumaa.

Satunnaislukujen avulla voimme tuottaa edustavia näytteitä jonkin systeemin syöteavaruudesta. Sellaista menettelyä, jossa tällaisia kokeiluja systemaattisesti tuotetaan ja jossa tuloksien pohjalta tehdään johtopäätöksiä tarkasteltavasta ilmiöstä, kutsutaan simuloinniksi. Simulointia käytetään erityisesti silloin, kun ilmiö on niin monimutkainen, ettei sitä pystytä toivotulla tarkkuudella kuvaamaan matemaattisella mallilla. Simulointia käytetään myös, jos halutaan tehdä numeerisia kokeita systeemeistä, joita ei todellisuudessa voida toteuttaa esim. kalliiden kustannusten vuoksi. Konkreettisena esimerkkinä voidaan mainita puhelinverkkoliikenteen simulointi. Mielenkiinnon kohteena voi silloin toisaalta olla palvelun ja kapasiteetin parametrien tarkkailu, toisaalta systeemin mitoitukseen liittyvät parametrit.

Luvussa 1 esitimme muutamia pieniä simulointiohjelmia, mm. nopanheiton simulointiin. Satunnaisluvut generoitiin siellä C-kielen standardikirjastoon kuuluvan satunnaislukugeneraattorin avulla. NR esittää kritiikkiä satunnaislukugeneraattoreista ja luettelee joitakin perusteellisesti testattuja generaattoreita.

Yleistoteamuksena voi sanoa, että

- Generaattoreiden laatu vaihtelee merkittävästi.
- Generaattoreita kehitetään edelleen vilkkaasti.
- Implementaatiot riippuvat ohjelmointikielestä ja kääntäjästä.

• Useat generaattorit tuottavat jaksollisen lukujonon (jakso voi olla pitkäkin).

Esimerkkinä uudesta laajaa huomiota saaneesta generaattorista, ks. Mersenne twister

`http://www.math.keio.ac.jp/~matumoto/emt.html`

Todennäköisyyslaskennan perustulosten nojalla satunnaismuuttujan funktion jakauma voidaan palauttaa alkuperäiseen jakaumaan muuttujanvaihtokaavan avulla. Tämän vuoksi tasaisesta jakaumasta voidaan generoida sopivan muunnoksen avulla kaikki käytännössä tarvittavat jakaumat. Ks. erityisesti A. M. Law - W. D. Kelton: Simulation modeling and analysis, McGraw Hill, 2000, ISBN 0-07-059292-6, Luku 8.

Lause. Olkoot X, Y jatkuvia satunnaismuuttujia tiheysfunktiona $f_{XY}(x, y)$ sekä $G, H : R^2 \to R$ funktioita ja $U = G(X, Y), V = H(X, Y)$ satunnaismuuttujia. Oletetaan, että yhtälöryhmästä

$$\begin{cases} G(x, y) = u \\ H(x, y) = v \end{cases}$$

voidaan x ja y ratkaista yksikäsitteisesti u:n ja v:n funktiona ja että joukossa, jossa $f_{XY}(x, y) > 0$ pätee

$$\frac{\partial(G, H)}{\partial(x, y)} = \frac{\partial G}{\partial x}\frac{\partial H}{\partial y} - \frac{\partial G}{\partial y}\frac{\partial H}{\partial x} \neq 0\,.$$

Silloin satunnaismuuttujien U ja V yhteisjakauman tiheysfunktio on

$$f_{UV}(u, v) = f_{XY}(x, y)\left|\frac{\partial(G, H)}{\partial(x, y)}\right|^{-1}$$

missä (x, y) on em. yhtälöryhmän ratkaisu.

Boxin-Müllerin muunnos. Olkoot x_1, x_2 riippumattomia satunnaismuuttujia, jotka noudattavat välin $[0, 1]$ tasaista jakaumaa. Silloin muuttujat z_1, z_2

$$z_1 = \sqrt{-2\log x_1}\cos(2\pi x_2), \quad z_2 = \sqrt{-2\log x_1}\sin(2\pi x_2)$$

ovat riippumattomia $N(0,1)$-normaalijakautuneita satunnaismuuttujia.Tämä seuraa edellisestä valinnalla $U = z_1, V = z_2$.

NR:n ohjelma `NR::gasdev` perustuu Boxin-Müllerin menetelmään. Demo-ohjelma `xgavdev.cpp` tuottaa seuraavan normaalijakautuman profiilin.

```
 x       p(x)    graph:

   0   0.0115  ****
 0.2   0.0176  *******
 0.4   0.0213  ********
 0.6   0.0291  ***********
 0.8   0.0403  ****************
   1   0.0479  ******************
 1.2   0.0591  ************************
 1.4   0.0674  ***************************
 1.6   0.0769  *******************************
 1.8    0.073  ******************************
   2   0.0795  ********************************
 2.2   0.0799  ********************************
 2.4   0.0751  ******************************
 2.6   0.0696  ****************************
 2.8   0.0573  ***********************
   3   0.0476  ******************
 3.2   0.0391  ***************
 3.4   0.0293  ***********
 3.6   0.0208  ********
 3.8   0.0154  ******
   4   0.0101  ****
```

Seuraava ohjelma on `xran.cpp` /NR hieman muokattuna.

```
/* FILE: myrantst.cpp begins.                                    */
/*  g++ -Wall myrantst.cpp -L../lib -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr  */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
```

```
#include <iomanip>
#include "nr.h"
#include <cmath>
#include "matutl02.h"

using namespace std;

DP myrdm(int &seed)
{
  static int init=1;
  unsigned seed2=(seed>0)? seed:(-seed);
  if(init) { srand(seed2); init=0; }
  DP t=((DP)rand())/((DP)0x7fffffff); // 2^31
  return t;
}

// Driver for routines ran0, ran1, ran2, ran3
DP fnc(const DP x1, const DP x2, const DP x3, const DP x4)
{
  return sqrt(x1*x1+x2*x2+x3*x3+x4*x4);
}

void integ(DP func(int &))
{
  const unsigned long twotoj[16]={0x1L,0x2L,0x4L,0x8L,0x10L,
    0x20L,0x40L,0x80L,0x100L,0x200L,0x400L,0x800L,0x1000L,
    0x2000L,0x4000L,0x8000L};
  const DP PI=3.141592653589793238;
  int i,idum=(-1),j,jpower,k;
  DP x1,x2,x3,x4;
  Vec_INT iy(3);
  Vec_DP yprob(3);

  // Calculates pi statistically using volume of unit n-sphere
  for (i=0;i<3;i++) iy[i]=0;
  cout << "volume of unit n-sphere, n = 2, 3, 4" << endl;
  cout << "# points      pi       (4/3)*pi   (1/2)*pi^2";
  cout << endl << endl;
  cout << fixed << setprecision(6);
  for (j=0;j<15;j++) {
    for (k=twotoj[j];k>=0;k--) {
      x1=func(idum);
      x2=func(idum);
      x3=func(idum);
      x4=func(idum);
```

```
      if (fnc(x1,x2,0.0,0.0) < 1.0) ++iy[0];
      if (fnc(x1,x2,x3,0.0) < 1.0) ++iy[1];
      if (fnc(x1,x2,x3,x4) < 1.0) ++iy[2];
    }
    jpower=twotoj[j+1];
    for (i=0;i<3;i++)
      yprob[i]=DP(twotoj[i+2])*iy[i]/jpower;
    for (i=0;i<3;i++) yprob[i]=DP(twotoj[i+2])*iy[i]/jpower;
    cout << setw(6) << jpower << setw(12) << yprob[0];
    cout << setw(12) << yprob[1] << setw(12) << yprob[2] << endl;
  }
  cout << endl << "actual" << setw(12) << PI;
  cout << setw(12) << 4.0*PI/3.0 << setw(12) << 0.5*PI*PI << endl;
  cin.get();
}

int main(void)
{
  cout << endl << "Testing ran0:" << endl; integ(NR::ran0);
  cout << endl << "Testing ran1:" << endl; integ(NR::ran1);
  cout << endl << "Testing ran2:" << endl; integ(NR::ran2);
  cout << endl << "Testing ran3:" << endl; integ(NR::ran3);
  cout << endl << "Testing rand:" << endl; integ(myrdm);
  return 0;
}
/* FILE: myrantst.cpp ends.                                    */

Testing ran0:
volume of unit n-sphere, n = 2, 3, 4
# points      pi       (4/3)*pi   (1/2)*pi^2

     2           2           0           0
     4           3           4           8
     8         2.5           4           6
......
  4096      3.1084     4.10352           5
  8192     3.10547     4.09766     4.96484
 16384     3.11987     4.13916     4.97656
 32768     3.12891     4.15674     4.92285

actual     3.14159     4.18879      4.9348

Testing ran1:
volume of unit n-sphere, n = 2, 3, 4
# points      pi       (4/3)*pi   (1/2)*pi^2
```

```
     2           2           4           0
     4           3           2           0
.......
 16384     3.12866     4.20264     4.93066
 32768     3.14172     4.18262     4.90234

actual     3.14159     4.18879      4.9348

Testing ran2:
volume of unit n-sphere, n = 2, 3, 4
# points      pi       (4/3)*pi   (1/2)*pi^2

     2           4           4           8
     4           5           6          12
.....
 16384      3.1499     4.13135     4.79297
 32768     3.15149     4.16797     4.87695

actual     3.14159     4.18879      4.9348

Testing ran3:
volume of unit n-sphere, n = 2, 3, 4
# points      pi       (4/3)*pi   (1/2)*pi^2

     2           4           4           0
     4           5           4           4
.....
 16384     3.15186     4.14941     4.82031
 32768     3.13989     4.13086       4.854

actual     3.14159     4.18879      4.9348

Testing rand:
volume of unit n-sphere, n = 2, 3, 4
# points      pi       (4/3)*pi   (1/2)*pi^2

     2           4           4           0
     4           5           6           0
.....
 16384     3.14331      4.2085     4.91309
 32768     3.13098     4.17725     4.92578

actual     3.14159     4.18879      4.9348
```

Ylläolevassa ohjelmassa vertaillaan eri generaattorien tuottamia

lukuja ja viimeisenä on mukana kurssin alusta käytössä generaattori rand.

Internetissä on saatavilla useita satunnaislukujen generointiohjelmia. Mainittakoon esim. RANLIB-kirjasto, joka löytyy osoitteesta

http://netlib.bell-labs.com/netlib/random/index.html .

file: ranlib.c.tar.gz

for: random number generation from the distributions: beta, chi-square, exponential, F, gamma, multivariate normal, noncentral chi-square, noncentral F, univariate normal, uniform, binomial, negative binomial, multinomial, Poisson; also: random permutations of an integer array. by: Barry W. Brown, James Lovato, Kathy Russell alg: (base) L'Ecuyer and Cote, ACM TOMS 17:98-111 (1991) lang: C

file: dcdflib.c.tar.gz

for: cumulative distribution functions, inverses, and parameters for: beta, binomial, chi-square, noncentral chi-square, F, noncentral F, gamma, negative binomial, normal, Poisson, Student's t. alg: various TOMS algorithms and Abramowitz and Stegun; Bux Dekker zero-finding by: Barry W. Brown, James Lovato, Kathy Russell lang: C

Em. RANLIB-kirjastoa ei pidä sekoittaa Unixin samannimiseen käskyyn jota käytetään ohjelmakirjastojen laatimisessa.

Muuta kirjallisuutta:

L. Devroye: Non-uniform random variate generation, Springer-Verlag, 1986

D. Knuth: The art of computer programming, Vol. II.

8 LAJITTELUMENETELMISTÄ

NR:n käsittelemiä aiheita:

• Lukujonon järjestys suuruusjärjestykseen.

• Lukujonon indeksitaulun laatiminen: ts. monesko alkio on pienin, toiseksi pienin jne.

• Lukujonon rankkeeraus: etsitään kunkin alkion arvojärjestys.

8.1. Algoritmeja.

Suora lomitus (merge) on toteutettu algoritmina `NR::piksrt`. Käytettään tavanomaista korttipakan järjestysmenetelmää.

-järjestetään jonon 2 ensimmäistä alkiota

-lisätään 3. alkio mukaan oikealle paikalleen

-jatketaan kunnes koko jono käsitelty. Kompleksisuus $O(N^2)$

Kekolajittelu (heapsort, perustuu prioriteettijonon eli keon käyttöön) `NR::sort`.

Indeksitaulun muodostus

Ohjelma `xindexx.cpp` tarvitsee syötetiedoston `arrin`

Tuloste: `NR::indx` jolla `NR::arrin(indx(J)), J=1,...,N` kasvavassa järj.

Pikalajittelu `NR::qcksrt` (Bubble sort: NR:n mukaan tehoton ja mielenkiinnoton)

```
/* FILE: xindexx.cpp begins */
/* Driver for routine indexx */
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include "nr.h"
#include "print_array.h"
using namespace std;
// Driver for routine indexx
int main(void)
```

```
{
        const int NP=100;
        string txt;
        int i,j;
        Vec_INT indx(NP);
        Vec_DP a(NP);
        ifstream fp("tarray.dat");
        if (fp.fail())
          NR::nrerror("Data file tarray.dat not found");
        getline(fp,txt);
        for (i=0;i<NP;i++) fp >> a[i];
        NR::indexx(a,indx);
        cout << endl << "original array:" << endl;
        cout << fixed << setprecision(2);
        print_array(a,10,7);
        cout << endl << "sorted array" << endl;
        for (i=0;i<10;i++) {
          for (j=0;j<10;j++) cout << setw(7) << a[indx[10*i+j]];
          cout << endl;
        }
        return 0;
}
original array:
     30     72    3.3     87     53     63     89     26     93     28
     72     48     53     18     27     60     83     23     67     53
     53     15      8     53     76     79     68     38     25     73
     13     52     35  1e+02     38     82     62     80     93    3.2
     99     92     94      7    6.7     89     83      9     13     62
      3     85     96     74     49     78     37    3.5     49     72
    1.4    9.5     32     90     28     79     54     46     12     38
     77     74     10    4.6     50     68     19     34    4.1     98
     42     64     89     53     72    3.9     20     45     71     59
     28     16     68     56     26     25     82     90     57     38

sorted array
    1.4      3    3.2    3.3    3.5    3.9    4.1    4.6    6.7      7
      8      9    9.5     10     12     13     13     15     16     18
     19     20     23     25     25     26     26     27     28     28
     28     30     32     34     35     37     38     38     38     38
     42     45     46     48     49     49     50     52     53     53
     53     53     53     53     54     56     57     59     60     62
     62     63     64     67     68     68     68     71     72     72
     72     72     73     74     74     76     77     78     79     79
     80     82     82     83     83     85     87     89     89     89
     90     90     92     93     93     94     96     98     99  1e+02
```

9 EPÄLINEAARISET YHTÄLÖRYHMÄT

Algebran peruslauseen mukaan astetta p olevalla polynomilla on täsmälleen p juurta kompleksitasossa. Jos $p = 2, 3, 4$, niin juuret voidaan esittää algebrallisina lausekkeina kertoimista, mutta vastaava esitys ei enää ole mahdollista millekään asteelle $p \geq 5$. Yhtälön ratkaisu johtaa tavallisesti tilanteeseen, jossa voidaan kokeilla numeerisen ratkaisumenetelmän soveltuvuutta. Tässä luvussa luodaan katsaus niihin menetelmiin, joita oppikirjamme NR tarjoaa epälineaarisen yhtälön tai yhtälöryhmän ratkaisemiseen.

Aihepiiriä on tutkittu satoja vuosia. 1600-luvulta on peräisin Newtonin tai Newtonin-Raphsonin menetelmä, jonka suppenemisalue on viime vuosiin saakka pysynyt mysteerinä. Vasta ns. kompleksidynamiikan tutkimus 1980-luvulta alkaen on tuonut asiaan uutta näkemystä. On osoittautunut, että suppenemisalue on geometriseltä struktuuriltaan varsin monimutkainen, sen reuna on ns. fraktaalijoukko. Kysymys siitä suppeneeko iteraatio annetulla alkuarvolla on edelleen avoin.

Olkoon $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$ jatkuva funktio ja $m, n \geq 1$.

Perustehtävä: Etsi $x \in \mathbb{R}^n$ s.e. $f(x) = 0$.

Mahdollisia vaikeuksia:

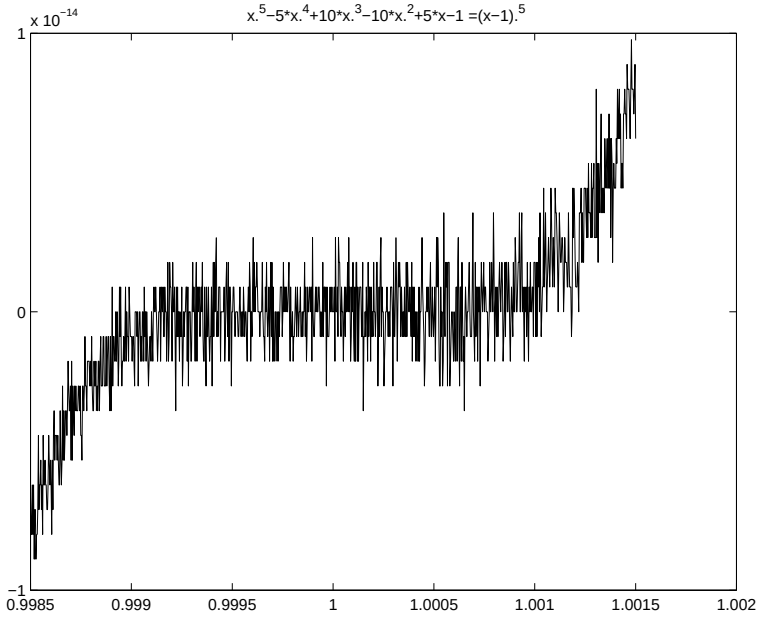
-Reaalisen ratkaisun olemassaolo epävarmaa.

-Yksikäsitteisyys voi puuttua tai olla vain lokaalia. Mistä juurta etsitään? Mistä saadaan hyvä alkuarvaus?

-Tapaus $m, n \geq 2$ on vaikeampi kuin tapaus $m = n = 1$. Jos $n = m = 1$, niin juuri voidaan löytää paikallistamalla (bracket) se ensin välille (x_1, x_2) s.e. $f(x_1)f(x_2) < 0$, ja sitten iteroimalla esim. välinpuolitusmenetelmällä.

-Jos f on epälineaarinen niin ratkaisumenetelmä on aina iteratiivinen. Miten löytyy alkuarvaus?

-Juurien multiplisiteetti. Jos $n = m = 1$ ja multiplisiteetti parillinen, niin juurien paikallistaminen merkinvaihtovälille tulee ongelmalliseksi. Esim. funktiolla $F(x) = x^2$ on juuri välillä $(-1, 1)$, vaikka se ei vaihdakaan merkkiään tällä välillä.



-Juuren "sumeus"numeerisessa mielessä muistettava tarkkuuskriteereitä määrättäessä.

Huom. Yhteys minimointiongelmaan: Yhtälön $f(x) - y = 0$ ratkaisu on sama kuin funktion $(f(x) - y)^2 = (f(x) - y)^\top (f(x) - y)$ minimi.

Menetelmät:

(a) **Brentin menetelmä**: Annettu yhden muuttujan funktio, tiedetään nollakohdan sijaintiväli, etsitään juuri. Ei tarvita derivaattaa. (1970-luku)

(b) **Newton(-Raphson)**: Kuten yllä, mutta tarvitaan derivaattaa.

(c) **Muita menetelmiä**:

-Välinpuolitusmenetelmä, arvojen taulukointi

-Sekanttimenetelmä

-Polynomifunktioille sopivat menetelmät

(d) **Graafinen ratkaisu**: Kätevä esim. alkuarvauksen saamiseen muille menetelmille. Algoritmi `NR::scrsho`.

9.1. Juurien paikallistaminen ja välinpuolitusmenetelmä. Analyysin peruskurssilla todistetaan seuraava lause.

Rolle'n lause. Olkoon f jatkuva välillä $[a, b]$ ja $f(a)f(b) < 0$. Tällöin f:llä on välillä $[a, b]$ nollakohta.

Juuren haun kannalta hankala testiongelma on seuraava: Ratkaise $f(x) = 0$; $f(x) = 3x^2 + \frac{1}{\pi^4}\log[(\pi - x)^2] + 1$ (2 juurta välillä $\pi \pm 10^{-667}$).

NR:n algoritmit `NR::zbrac` ja `NR::zbrak` on tarkoitettu paikallistamaan juuri. (Tuskin nekään toimivat yo. funktion tapauksessa.)

`NR::zbrac` laajentaa alkuperäistä väliä s. 352 (`NR::zbrak` pienentää).

Välinpuolitusmenetelmä. Olkoon f jatkuva välillä $[a, b]$ ja $f(a)f(b) < 0$, $c = (a + b)/2$. Jos $f(a)f(c) < 0$ niin korvataan b c:lla, muuten a c:llä. Iteroidaan.

Tämä menettely oli esillä jo Luvun I algm:ssa `mybisect.cpp`. Palautetaan sieltä mieleen, että algm soveltui myös käänteisfunktion arvojen laskemiseen.

9.2. Sekanttimenetelmä ja regula falsi. Regula falsi menetelmää kutsutaan joskus myös false position menetelmäksi.

Sekä sekanttimenetelmä että regula falsi kumpikin olettavat, että funktion nollakohta on paikallistettu välille (a, b) ja vielä funktiota approksimoidaan lineaarisella funktiolla, jonka leikkauspiste x-akselin kanssa antaa juurelle likiarvon c. Kunkin iteraation aikana yksi aikaisempi piste "unohdetaan".

Ainoa ero: Regula falsi säilyttää aikaisemmista pisteistä sen, jolla on erimerkkinen arvo $f(c)$:n kanssa [jolloin nollakohta on paikallistettu välille (a, c) tai (c, b)], kun taas sekanttimenetelmä säilyttää

viimeksi löydetyn pisteistä a ja b [sekanttimenetelmässä juuren ei siis tarvitse olla paikallistettu uudella välillä].

Esim. Oletetaan, että f on kuten NR:n s. 355 olevassa kuvassa 9.2.2 ja sekanttimenetelmä on tuottanut pisteet $x_1 < x_2$ (ts. ensin löydetty x_1, sitten x_2)

Tällöin sekanttimenetelmä antaa uudeksi väliksi (x_3, x_2), joka ei sisällä nollakohtaa (suppeneminen epävarmaa).

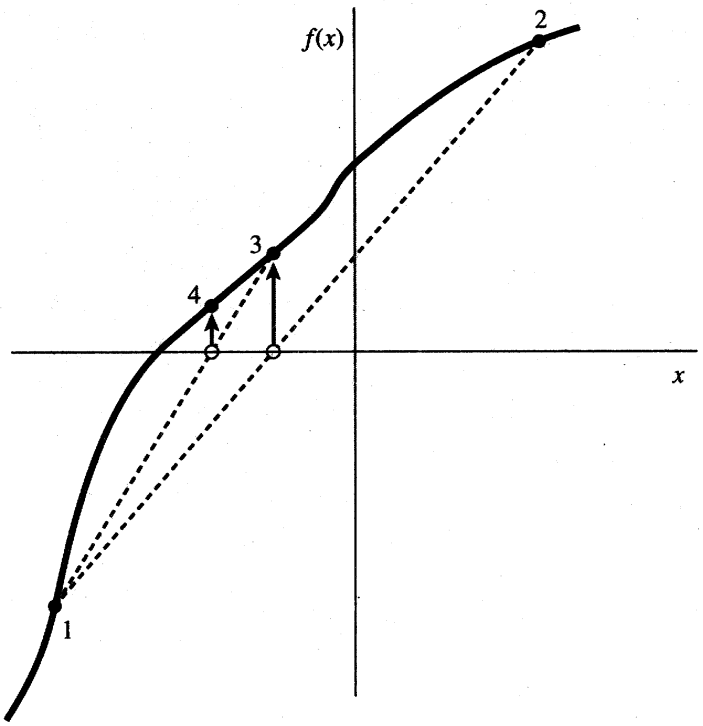


Figure 9.2.2. False position method. Interpolation lines (dashed) are drawn through the most recent points *that bracket the root.* In this example, point 1 thus remains "active" for many steps. False position converges less rapidly than the secant method, but it is more certain.

Algoritmi `NR::rtflsp` s. 356 ja `NR::rtsec`.

Supetessaan sekä sekanttimenetelmä että regula falsi ovat hitaita, mutta yleensä molemmat ovat parempia kuin välinpuolitusmenetelmä.

Esimerkki, jossa regula falsi on hidas on annettu kirjan sivulla 356 olevassa Kuvassa 9.2.3.

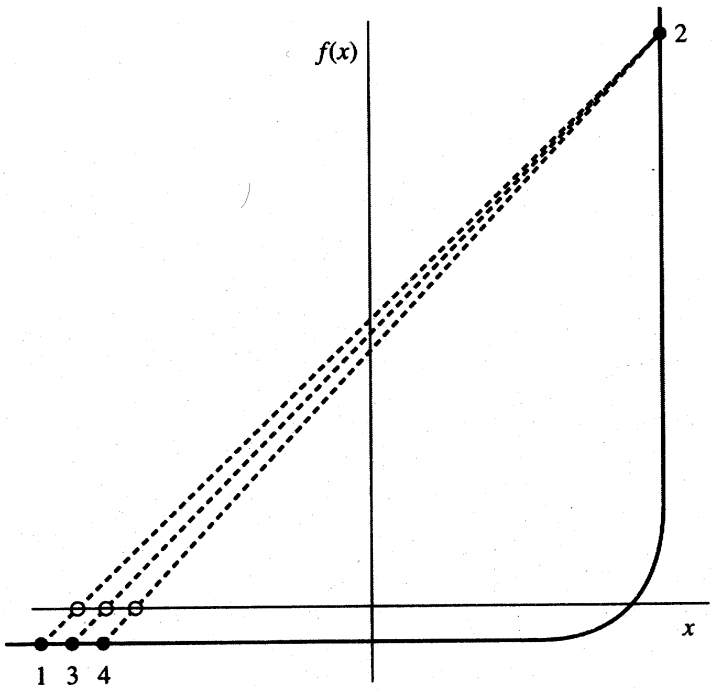


Figure 9.2.3. Example where both the secant and false position methods will take many iterations to arrive at the true root. This function would be difficult for many other root-finding methods.

9.3. Brentin menetelmä. On esimerkkejä, joissa sekanttimenetelmä ja regula falsi ovat hitaampia kuin välinpuolitusmenetelmä (mm. eräät sileät funktiot, joiden 2. derivaatta muuttuu sopivasti nollakohdan lähellä). Ns. **Brentin menetelmä** (v. 1973) yhdistää näiden kolmen menetelmän hyvät puolet. Brentin menetelmän piirteet:

- juuren paikallistus
- välinpuolitus
- *käänteinen kvadraattinen interpolointi*

Sekanttimenetelmä ja regula falsi approksimoivat funktiota lineaarisesti kahden juurta rajoittavan luvun välillä, kun taas käänteinen kvadraattinen interpolointi käyttää kolmea aikaisempaa pistettä kvadraattisen funktion sovittamiseen niiden kautta ja uuden likiarvon löytämiseen.

Jo löydettyihin pistepareihin a, $f(a)$, b, $f(b)$ ja c, $f(c)$, sovitetaan Lagrange'n interpolointipolynomi g vaihtamalla x, y-akselit

keskenään. Silloin $g(0)$ on uusi approksimaatio juurelle ja Lagrangen kaavan nojalla sille saadaan eksplisiittinen lauseke lukujen $a,\ f(a)$, $b,\ f(b)$ ja $c,\ f(c)$ avulla.

Brentin menetelmä antaa juuren "likiarvoiksi" $g(0)$:n mikäli $g(0)$ on sillä välillä johon juuri on suljettu ja mikäli väli kutistuu kyllin nopeasti. Jos ei, otetaan $g(0)$:n asemasta välinpuolitusaskel.

9.4. Newtonin menetelmä. Käytetään approksimointia

$$f(x+\delta) = f(x) + f'(x)\delta + \frac{f''(x)}{2}\delta^2.$$

Kun δ^2:n sisältävä termi unohdetaan, niin vaatimus $f(x+\delta) = 0$ johtaa lausekkeeseen $\delta = -\frac{f(x)}{f'(x)}$, jolloin $x+\delta$ on juuren approksimaatio.

Newtonin algoritmi. Kiinnitetään x_0 ja asetetaan
$x_{i+1} = x_i - f(x_i)/f'(x_i),\ i = 1, 2, 3, \ldots$
Oletetaan, että $f'(x) \neq 0$. Algoritmi `NR::rtnewt` .

Newtonin algoritmi vaimennuksella. Kuten edellä, mutta hyväksytään x_{i+1} vain, jos $|f(x_{i+1})| < |f(x_i)|$. Muussa tapauksessa puolitetaan askelpituutta δ kunnes tämä ehto tulee voimaan.

Newtonin menetelmää ja sen erästä pulmatilannetta havainnollistavat NR:n sivulla 363 olevat kuvat 9.4.1 ja 9.4.2 jotka ovat myös oheisina.

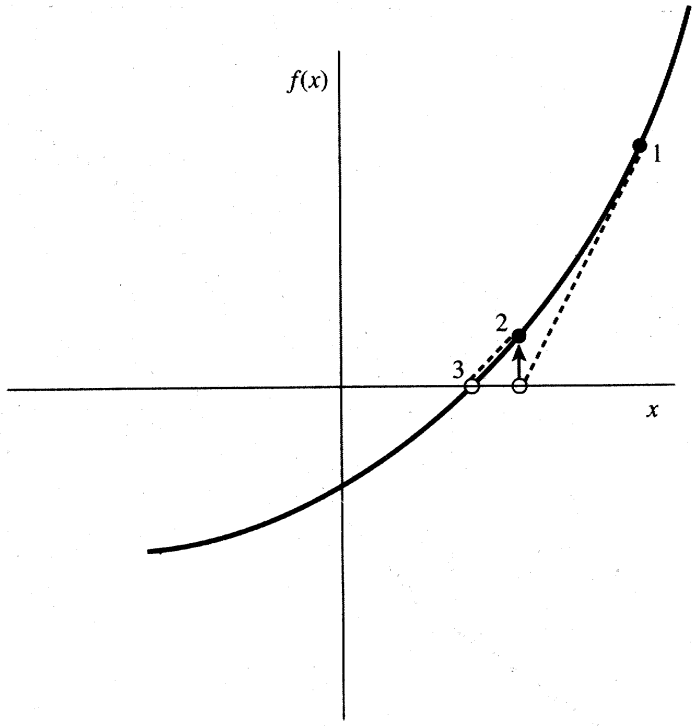


Figure 9.4.1. Newton's method extrapolates the local derivative to find the next estimate of the root. In this example it works well and converges quadratically.

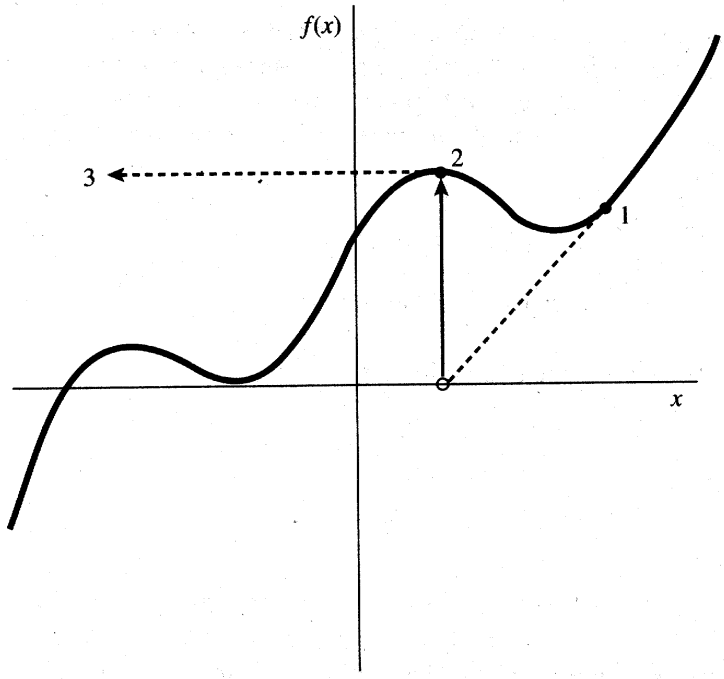


Figure 9.4.2. Unfortunate case where Newton's method encounters a local extremum and shoots off to outer space. Here bracketing bounds, as in `rtsafe`, would save the day.

Algoritmi `NR::rtsafe` sisältää lisäpiirteitä: se estää uusien askeleiden "karkaamisen" väliltä, jolla nollakohtaa etsitään.

```
// FILE: mysafe.cpp begins
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include "nr.h"
using namespace std;

// Driver for routine rtsafe

DP fx(const DP x)
{
  return exp(x)-3*x*x;
}

void funcd(const DP x,DP &fn, DP &df)
{
  fn=exp(x)-3*x*x;
  df=exp(x)-6*x;
}

int main(void) {
  const int N=100,NBMAX=20;
  const DP X1=1.0,X2=50.0;
  int i,nb=NBMAX;
  DP xacc,root;
  Vec_DP xb1(NBMAX),xb2(NBMAX);

  NR::zbrak(fx,X1,X2,N,xb1,xb2,nb);
  cout << endl << "Roots of f(x):" << endl;
  cout << setw(20) << "x" << setw(16) << "f(x)" << endl;
  cout << fixed << setprecision(6);
  for (i=0;i<nb;i++)
  {
    xacc=(1.0e-6)*(xb1[i]+xb2[i])/2.0;
    root=NR::rtsafe(funcd,xb1[i],xb2[i],xacc);
    cout << "root" << setw(4) << (i+1) << setw(15) << root;
    cout << setw(15) << fx(root) << endl;
  }
  return 0;
}
// FILE: mysafe.cpp ends
```

```
Roots of f(x):
                    x            f(x)
root   1        3.73308    5.73975e-11
```

Keskeinen kysymys Newtonin iteraatiossa on, miten löydetään sellainen alkupiste x_0, josta iteraatio suppenee kohti juurta.

Hyvä alkuarvaus saadaan esim. graafisesti. Joskus voidaan soveltaa seuraavaa lausetta.

Lause. Olkoon f kahdesti jatkuvasti derivoituva suljetulla välillä $[a, b]$ ja olkoot seuraavat ehdot voimassa:
(1) $f(a)f(b) < 0$,
(2) $f'(x) \neq 0$, kun $x \in [a, b]$,
(3) $f''(x)$ on joko ≥ 0 tai ≤ 0, kun $x \in [a, b]$,
(4)

$$\frac{|f(a)|}{|f'(a)|} < b - a \quad \text{ja} \quad \frac{|f(b)|}{|f'(b)|} < b - a.$$

Tällöin Newtonin menetelmä suppenee kohden yhtälön $f(x) = 0$ yksikäsitteistä juurta kaikilla alkuarvoilla $x_0 \in [a, b]$.

Esim. Olkoon $f(x) = \arctan x$. Silloin yhtälöllä $f(x) = 0$ on juuri $x = 0$. Newtonin iteraatio on nyt $x_{k+1} = x_k - (1 + x_k^2) \arctan x_k$. Jos x_0 valit. s.e. $\arctan |x_0| > \frac{2|x_0|}{1+|x_0|^2}$, niin jono $\{x_k\}$ hajaantuu. Allaolevasta kaaviosta ilmenee Newtonin algoritmin käyttäytyminen eri alkuarvoilla:

```
 0   8.0000e-01   1.0000e+00   1.2000e+00   1.4000e+00   1.6000e+00
 1  -3.0658e-01  -5.7080e-01  -9.3758e-01  -1.4136e+00  -2.0034e+00
 2   1.8862e-02   1.1686e-01   4.7772e-01   1.4501e+00   3.5509e+00
 3  -4.4737e-06  -1.0610e-03  -6.9652e-02  -1.5506e+00  -1.4090e+01
 4   5.9690e-17   7.9631e-10   2.2505e-04   1.8471e+00   2.8520e+02
 5   0.0000e+00   0.0000e+00  -7.5990e-12  -2.8936e+00  -1.2720e+05
 6   0.0000e+00   0.0000e+00   0.0000e+00   8.7103e+00   2.5415e+10
 7   0.0000e+00   0.0000e+00   0.0000e+00  -1.0325e+02  -1.0146e+21
```

Taulukon ensimmäinen sarake ilmoittaa iteraatiokierroksen numeron $0-7$ ja ylin vaakarivi antaa alkuarvot. Havaitaan, että alkuarvoilla 0.8, 1.0, ja 1.2 algoritmi suppenee kohti haluttua juurta, kun taas alkuarvoilla 1.4 ja 1.6 se hajaantuu.

Esim. Seuraava esimerkki selvittää Newtonin iteraation suppenemista ko. funktioille koodista ilmenevin alkuarvoin.

```
// FILE : mynewt.cpp begins
// Solves f(x)=0 by Newton's method for several
// functions f.
#include<cmath>
#include<iostream>
#include<iomanip>

using namespace std;

double fx(int n, double x)
{
  double t;
  switch (n)
  {
    case 1:{t= sin(x)-x*x*x-1.0; break;}
    case 2:{t= x-log(x)-3.0; break;}
    case 3:{t= x*x*x-x-1.0;  break;}
    case 4: {t= sin(x)-x-2.0;  break;}
    case 5: {t= pow(x+1.0,5.0)*(x-1.0);  break;}
    default: t=1.0;
  }
  return t;
}

double dfx(int n, double x)
{
  double t;
  switch (n)
  {
    case 1: {t= cos(x)-3*x*x; break;}
    case 2:{t= 1.0-1.0/x;  break;}
    case 3: {t= 3*x*x-1.0;  break;}
    case 4: {t= cos(x)-1.0; break;}
    case 5:{t= pow(x+1.0,5.0)+(x-1.0)*5*pow(x+1.0,4.0); break;}
    default: t=1.0;
  }
```

```
  return t;
}

int main()
{
  int i,n;
  double x, xsta[] ={-1.0, 2.0, 1.5, 2.5, 0.5};
  for (n=0;n<5;n++) {
    x=xsta[n];
    cout<<"Function "<<n+1<<" :-------\n";
    for (i=0;i<6;i++) {
      cout.setf(ios::scientific);
      cout<<setw(14)<<x<<" "<<setw(14)<<fx(n+1,x)<<endl;
      x=x-fx(n+1,x)/dfx(n+1,x);
    }
  }
  return 0;
}
// FILE : mynewt.cpp ends
```

```
Function 1 :-------
 -1.000000e+00  -8.414710e-01
 -1.342103e+00   4.434889e-01
 -1.256439e+00   3.246611e-02
 -1.249104e+00   2.279121e-04
 -1.249052e+00   1.151122e-08
 -1.249052e+00   1.218643e-16
Function 2 :-------
  2.000000e+00  -1.693147e+00
  5.386294e+00   7.024367e-01
  4.523714e+00   1.438074e-02
  4.505252e+00   8.350548e-06
  4.505241e+00   2.837730e-12
  4.505241e+00   4.440892e-16
Function 3 :-------
  1.500000e+00   8.750000e-01
  1.347826e+00   1.006822e-01
  1.325200e+00   2.058362e-03
  1.324718e+00   9.243778e-07
  1.324718e+00   1.866847e-13
  1.324718e+00   1.376937e-16
Function 4 :-------
  2.500000e+00  -3.901528e+00
```

```
  3.338608e-01  -2.006168e+00
 -3.599939e+01   3.499109e+01
 -4.994674e+00   3.955095e+00
  4.874778e-01  -2.019079e+00
 -1.684621e+01   1.575411e+01
Function 5 :-------
  5.000000e-01  -3.796875e+00
 -2.500000e-01  -2.966309e-01
 -4.204545e-01  -9.286774e-02
 -5.466622e-01  -2.961456e-02
 -6.429758e-01  -9.530584e-03
 -7.176249e-01  -3.083615e-03
```

Kirjoittamalla $\varphi(x) = x - f(x)/f'(x)$ huomataan, että Newtonin iterointi on esimerkki kiintopisteiteroinneista, joista jo edellä Luvuissa 1 ja 2 oli puhetta. Lisäksi $\varphi'(x) = f(x)f"(x)/(f'(x)^2)$.

Lause. Olkoon $f : [a, b] \to R$ kahdesti jatkuvasti differentioituva. Oletamme, että on olemassa vakio $c \in (0, 1)$, jolle kaikilla $x \in [a, b]$ pätee

$$|\frac{f(x)f''(x)}{(f'(x))^2}| \leq c < 1.$$

Silloin Newtonin iteraatio suppenee kaikilla alkuarvoilla $x_0 \in [a, b]$.

Lause. Olkoon $f : [a, b] \to R$ kahdesti jatkuvasti differentioituva. Oletamme, että $f''(x) > 0$ välillä $[a, b]$ ja lisäksi $f(a) > 0, f(b) \leq 0$. Silloin Newtonin iteraation muodostama pistejono alkuarvolla $x_0 = a$ suppenee monotonisesti kohti juurta.

Yhteenveto Newtonin menetelmästä.

• Iteraation askeleet määräytyvät käyrälle piirrettyjen tangenttien leikkauspisteestä x-akselin kanssa.

• Hyvä alkuarvaus on tarpeen. Muuten iteraatio voi hajaantua tai supeta kohden lukua, joka ei ole juuri. Jopa pieni muutos alkuarvoon voi vaikuttaa oleellisesti algoritmin käyttäytymiseen.

• Jos menetelmä suppenee, niin konvergenssi on tavallisesti varsin nopeaa.

• Soveltuu myös kompleksijuurien etsimiseen. Luokittelu suppeneviin ja hajaantuviin alkuarvoihin on vaikeaa, vrt. NR:n sivulla 368 oleva Kuva 9.4.4.

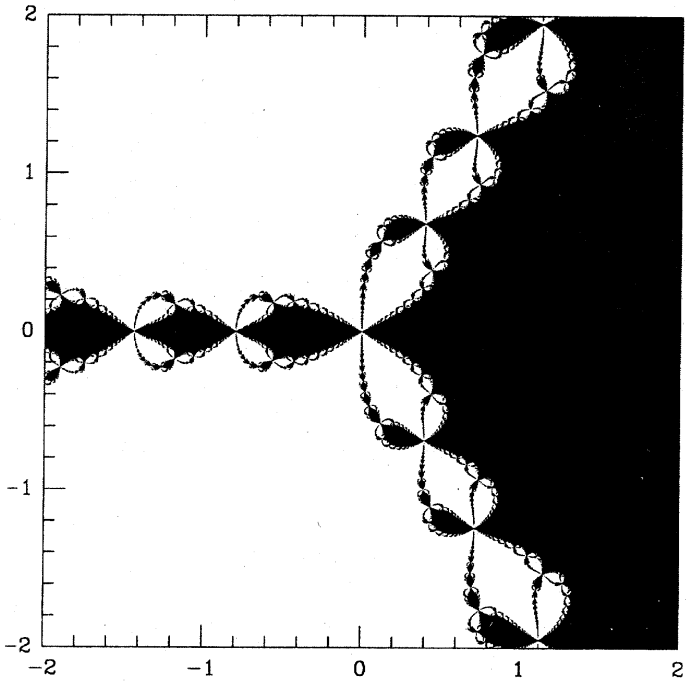


Figure 9.4.4. The complex z plane with real and imaginary components in the range $(-2, 2)$. The black region is the set of points from which Newton's method converges to the root $z = 1$ of the equation $z^3 - 1 = 0$. Its shape is fractal.

9.5. Polynomin juuret. Perusideoita polynomiyhtälön ratkaisussa ovat seuraavat.

• n asteen polynomilla on n juurta (multiplisiteetti).

• Jos $a + ib$ on juuri, niin myös $a - ib$ on juuri.

• Jos on löydetty polynomin P juuri x_0, niin $P = (x - x_0)Q(x)$ ja tekijä $(x - x_0)$ voidaan jakaa pois.

Algoritmi `NR::zroots` etsii polynomin $\sum_{i=1}^{n-1} A(i)x^{i-1}$ kaikki nollakohdat.

Algoritmi `NR::zroots`:n toiminnassa on 2 vaihetta

a) Etsitään alustavat juuret.

b) Parannetaan alustavien juurien tarkkuutta.

Juurien sijainti kompleksitasossa. Jos polynomi $P_n(x) = x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \ldots + a_1 x + a_0$ on reaalikertoiminen ja $|a_j| \leq M$ kaikilla j, niin P_n:n nollakohdat sijaitsevat tason $\mathbb{C}$ ympyrässä $\{z : \ |z| < M + 1\}$. Jos lisäksi tiedetään, että kaikki 0-kohdat ovat reaalisia niin ne kaikki ovat yhtälön $nx^2 + 2a_{n-1}x + (2(n-1)a_{n-2} - (n-2)a_{n-1}^2) = 0$ ratkaisujen määräämällä reaaliakselin välillä (ns. Laguerren lause).

9.6. Newtonin menetelmä usealle yhtälölle.

Yhtälöryhmän

$$\begin{cases} f(x,y) = 0 \\ g(x,y) = 0 \end{cases} \tag{1}$$

ratkaisua varten on etsittävä pistejoukkojen $f^{-1}(0)$ ja $g^{-1}(0)$ kaikki topologiset komponentit. Samoin kuin yhden muuttujan tapauksessa, hyvä alkuarvaus on tärkeä Newtonin algoritmille myös korkeammissa dimensioissa. Newtonin algoritmia koskeva tutkimus on laajaa. Eräs tutkimuksen suunta liittyy algoritmin suppenemisominaisuuksien parantamiseen, algoritmia sopivasti modifioimalla. Tätä ideaa on noudatettu ns. globaalisti suppenevassa Newtonin algoritmissa, joka tulee alempana esille.

Yleinen epälineaarinen yhtälöryhmä on muotoa

$$f_i(\overline{X}) = 0, \quad \overline{X} = (x_1, \ldots, x_N), \quad i = 1, \ldots, N$$

Taylorin kaava antaa approksimaation

$$f_i(X + \delta X) = f_i(X) + \sum_{j=1}^{N} \frac{\partial f_i}{\partial x_j} \delta x_j + O(\delta X^2).$$

Unohdetaan $O(\delta X^2)$-termi ja vaaditaan $f_i(X + \delta X) = 0$. Saadaan:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^{N} \alpha_{ij} \delta x_j = \beta_i = -f_i, \\ x_i^{(p+1)} = x_i^{(p)} + \delta x_i, \ i = 1, \ldots, N. \end{cases} \tag{2}$$

Tässä p on iteraatioaskeleen numero. Luvut δx_i saadaan ratkaisemalla (2) LU-menetelmällä. Algoritmi `NR::mnewt` (s. 381).

Kuten Kohdan 9.4 lopussa annettu esimerkki osoittaa, hyvä alkuarvaus on oleellinen Newtonin menetelmälle.

Lause (Newton-Kantorovitsh) Olkoon $B^n(r) = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < r\}$ ja $f : B^n(1) \to \mathbb{R}^n$ jatkuvasti differentioituva ja seuraavat ehdot voimassa

(a) $||Df(x) - Df(y)|| \leq \gamma||x - y|| \ \forall x, y \in B^n(1)$

(b) $||Df(0)^{-1}f(0)|| \leq \alpha$,

(c) $||Df(0)^{-1}|| \leq \beta$.

Merkitään

$$h = \alpha\beta\gamma \quad r_{1,2} = \frac{1 \mp \sqrt{1-2h}}{h}\alpha$$

Jos $h \leq 1/2$ ja $r_1 < 1$ niin jono

$$x_{k+1} = x_k - Df(x_k)^{-1}f(x_k), \ x_0 = 0, \ k = 0, 1, 2, ...$$

pysyy joukossa $B^n(r_1)$ ja konvergoi kohti f:n 1-käsitteistä juurta joukossa $B^n(r_2)$.

Tod. Ks. esim. Stoer-Bulirsch.

9.7. Esimerkkejä Newton-iteroinnista. Soveltamalla Newtonin menetelmää $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$ tapauksiin $f(x) = 1/x - a, \ x^2 - a, \ x^p - a$, saadaan käänteisluvun laskemiselle ja juurenotolle seuraavat algoritmit:

$$x_{n+1} = x_n(2 - ax_n) \to 1/a, \ 0 < x_0 < 2/a,$$

$$x_{n+1} = \frac{1}{2}(x_n + a/x_n) \to \sqrt{a}, \ x_0 > 0,$$

$$x_{n+1} = (1 - \frac{1}{p})x_n + \frac{a}{px_n^{p-1}} \to^p \sqrt{a}, \ x_0 > 0 \quad .$$

9.8. Lopetuskriteereistä. Virheraja, toleranssi, voidaan valita esim. vaatimalla, että suhteellinen virhe $\leq 10^{-6}$.

Huomaa, että nollan lähellä suhteellinen virhe voi olla ongelmallinen nimittäjässä mahdollisesti olevan nollan vuoksi.

Muita mahdollisia kriteereitä: virhe $< \varepsilon \cdot \frac{|x_1|+|x_2|}{2}$, missä x_1, x_2 paikallistavat juuren ja $\varepsilon = 10^{-6}$.

Lopetusehdoksi voidaan valita myös yläraja iteraatioiden lukumäärälle.

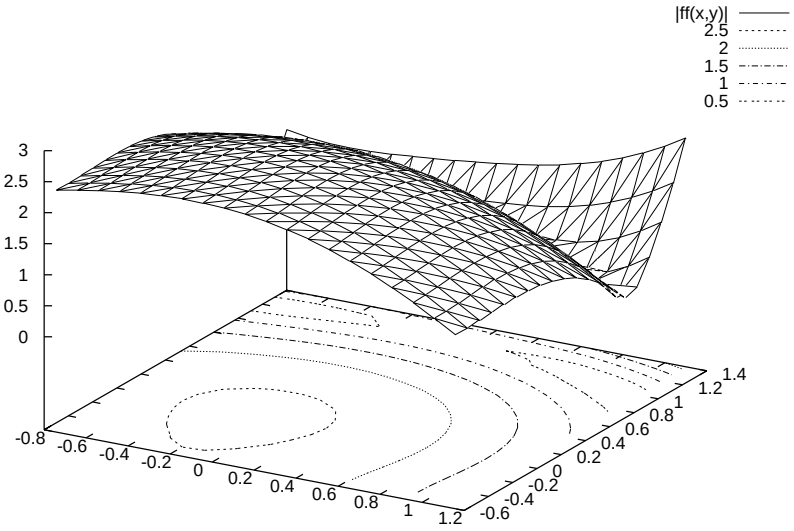
9.9. Globaalisti suppeneva Newtonin menetelmä. Edellä on jo yhden muuttujan tapauksessa tullut esille Newtonin menetelmän virhealttius iteraation alkupisteen valinnalle. Newtonin menetelmää voidaan hieman korjata niin, että saatu menetelmä suppenee lähes kaikilla alkuarvoilla. Oppikirjassamme on tällainen korjattu Newtonin menetelmä, ns. *globaalisti suppeneva* menetelmä. Lähtökohtana on korjata Newtonin menetelmää niin, että otetaan Newton-askel vain mikäli tarkasteltavan funktion normi vähenee siirryttäessä uuteen pisteeseen ja muulloin edetään Newtonin askeleen suunnassa lyhempi matka siten, että uudessa pisteessä ko. normi on pienempi. Idea on täsmälleen sama kuin yhdenmuuttujan Newtonin menetelmän yhteydessä mainitulla vaimennetulla Newtonin menetelmällä.

Tämä idea on toteutettu algoritmissa `NR::newt.c` s. 386, jonka käytöstä on esimerkki alla.

```
// FILE: mynewt2.cpp begins
// Solves a  system f(x,y)=0 by improved Newton method
// with several initial values
#include<iostream>
#include<iomanip>
#include<cmath>

#include "nr.h"
#include "gnusurf.h"

#define SCALE 1
#define N 2

using namespace std;

void funcv(Vec_I_DP &x,Vec_O_DP &f)
```

```
{
  f[0]=SQR(x[0])+SQR(x[1])-2.0;
  f[1]=exp(x[0]-1.0)+x[1]*SQR(x[1])-2.0;
}

double ff(double x, double y)
{
  Vec_DP u(N), v(N);
  DP tmp;
  u[0]=x; u[1]=y;
  funcv(u,v);
  tmp=v[0]*v[0]+v[1]*v[1];
  return pow(tmp, 0.5);
}

int main()
{
  int i, p,k;
  bool check;
  Vec_DP x(N),f(N),x0(N);
  double xx[]={-2.,10.},yy[]={-2.,10.};

  for (k=0;k<=3;k++)
    for (p=0;p<=3;p++)
    {
      x[0]=0.5+k; x0[0]=x[0];
      x[1]=0.5+p; x0[1]=x[1];
      cout<<" \n ---------------------- \n";
      cout<<"Before iteration: \n";
      for (i=0;i<N;i++)
        printf("%5d %12.6f %12.6f %12.4e\n",i,x0[i],x[i],f[i]);
      NR::newt(x,check,funcv);
      funcv(x,f);
      if (check) cout<<"Convergence problems.\n";
      cout<<"After iteration: \n";
      printf("%5s %12s %12s %12s\n","Index","xstart", "x","f");
      for (i=0;i<N;i++)
        printf("%5d %12.6f %12.6f %12.4e\n",i,x0[i],x[i],f[i]);
    }
  cout<<"Enter x0:\n";
  cin>>x[0];
  cout<<"Enter y0:\n";
  cin>>x[1];
  x0[0] = x[0];
  x0[1] = x[1];
```

```
  NR::newt(x,check,funcv);
  printf("%5s %12s %12s %12s\n","Index","xstart", "x","f");
  for (i=0;i<N;i++)
    printf("%5d %12.6f %12.6f %12.4e\n",i,x0[i],x[i],f[i]);
  gnusurf(ff,xx,yy,SCALE,0,"ff(x,y)","|ff(x,y)|");
  return 0;
}
// FILE: mynewt2.cpp ends

/*

After iteration:
Index       xstart            x            f
    0     3.500000     1.000000   6.4812e-10
    1     1.500000     1.000000   1.6371e-09

 ----------------------
Before iteration:
    0     3.500000     3.500000   6.4812e-10
    1     2.500000     2.500000   1.6371e-09
After iteration:
Index       xstart            x            f
    0     3.500000    -0.713747   9.9195e-13
    1     2.500000     1.220887   2.5931e-12

 ----------------------
Before iteration:
    0     3.500000     3.500000   9.9195e-13
    1     3.500000     3.500000   2.5931e-12
..............


*/
```


|ff(x,y)|
2.5
2
1.5
1
0.5
3
2.5
2
1.5
1
0.5
0
-0.8
-0.6
-0.4
-0.2
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
-0.6
-0.4
-0.2
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
1.2
1.4

10 MINIMOINTI JA MAKSIMOINTI

Johdantoa

Reaaliarvoisen funktion maksimointi palautuu minimointiin, sillä f:n maksimointi on sama kuin $(-f)$:n minimointi.

Pisteet X, Y, Z "sulkevat"(tai paikallistavat, engl. "bracket") minimin, jos funktion arvo Y:ssä on pienempi kuin X:ssä t. Z:ssa, ts. $f(Y) < \min\{f(X), f(Z)\}$.

Optimointi. Perustehtävänä kohdefunktion (object function) minimointi (tavallisesti useamman muuttujan funktio).

Rajoitettu optimointi (engl. constrained optimization). Tällöin muuttujilla on a priori-rajoituksia, esim. ratkaisun on oltava tietyssä alueessa.

Lineaarinen ohjelmointi (LO) (engl. linear programming (LP)). Nyt minimoitava funktio ja myös rajoite-ehdot lineaarisia. Ratkaisumenetelmänä on ns. simpleksialgoritmi.

NR:n suositukset optimointialgoritmeista ovat dimension mukaan jaoteltuina seuraavat.

Yksiulotteinen minimointi.

• Ilman derivaattojen käyttöä: *Brentin menetelmä* tai *kultaisen leikkauksen* haku.

• Derivaattojen avulla: Brentin menetelmän parannus, jossa käytetään derivaattoja.

Moniulotteinen minimointi.

Muistitilan tarve N tai N^2 voi olla pullonkaulana, jos avaruuden dimensio N on suuri.

• Nelder-Meadin simpleksihaku -menetelmä: derivaattoja ei tarvita. (Ei pidä sekoittaa lineaarisen ohjelmoinnin simplex menetelmään.)

• Suuntajoukko-menetelmä (Powellin menetelmä): ei tarvita derivaattoja. Tarvitaan 1-ulott. minimoinnin alialgoritmi, kuten Brent.

Derivaattojen käyttöön perustuu 2. algoritmiluokkaa, joista kumpikin tarvitsee 1-ulotteisen minimimoinnin alialgoritmin.

a) konjugaattigradienttimenetelmät (esim. Fletcher-Reeves ja Polak-Ribiere menet.) (muistitilan tarve N)

b) kvasi-Newton menetelmät (esim. Davidson-Fletcher-Powell (DFP) tai Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) (muistitilan tarve N^2).

Yleishuomautuksia.

• 1-ulott.tapauksessa f:n minimin haku $\Leftrightarrow$ f':n 0-kohtien haku

• Moniulotteisessa tapauksessa käytetään usein f:lle minimipisteen läheisyydessä kvadraattista approksimaatiota. Minimoinnin kannalta hankala esimerkkifunktio saattaa olla esim. $f(x, y) = x^{10} + y^{10}$.

Algoritmien toimintaa ei NR:ssä kuvata yksityiskohtaisesti juuri missään. Tämä koskee myös optimointialgoritmejä. Myöskään konvergenssitodistuksia ei esitetä.

Jyrkimmän laskun menetelmä.

Kirjamme ei esittele ns. jyrkimmän laskun (engl. steepest descent) menetelmää, koska se on em. menetelmiä paljon heikompi. Koska tämä menetelmä on kuitenkin geometriseen intuitioon vetoava ja erittäin yksinkertainen toteuttaa, on algoritmi kurssin www-sivulla saatavissa `mysteep5.cpp`. Ajatuksena on muodostaa murtoviiva, siten että se lähestyisi funktion minimikohtaa. Valitaan ensin lähtöpiste ja edetään siitä siihen suuntaan, jossa funktio voimakkaimmin vähenee, kunnes löydetään funktion lokaali minimi tällä suunnalla. Toistetaan sama uudessa pistessä.

Palautetaan mieleen, että em. voimakkaimman vähenemisen suunta on funktion negatiivisen gradientin suunta. Gradientin laskuun käytämme algoritmia `numjf.cpp`. Kohdefunktion pitää siis olla de-

rivoituva. On helppo osoittaa, että kahden peräkkäisen murtoviivan osana olevan janan välinen kulma on suora.

10.1 Kultaisen leikkauksen haku. Olkoon $a < b < c$. Sanotaan, että pisteet a, b, c *rajoittavat* (t. *paikallistavat* t. *sulkevat* t. *haarukoivat*) *minimin* (engl. bracket) jos, $f(b) < \min\{f(a), f(b)\}$.

Uusi minimin rajoittava kolmikko löydetään seuraavasti:

1) Tapaus $b - a > c - b$. Valitaan $x \in (a, b)$.
Jos $f(a) < f(x) \Rightarrow x, b, c$ rajoittavat minimiin $(a \leftarrow x)$.
Jos $f(x) < f(b) \Rightarrow \ a, x, b$ rajoittavat minimiin $(c \leftarrow b,\ b \leftarrow x)$
2) Tapaus $b - a < c - b$ kuten yllä mutta valitaan $x \in (b, c)$.

Iteroimalla vaiheita 1) & 2) kunnes $|a - c| < tol$ löydetään minimi.

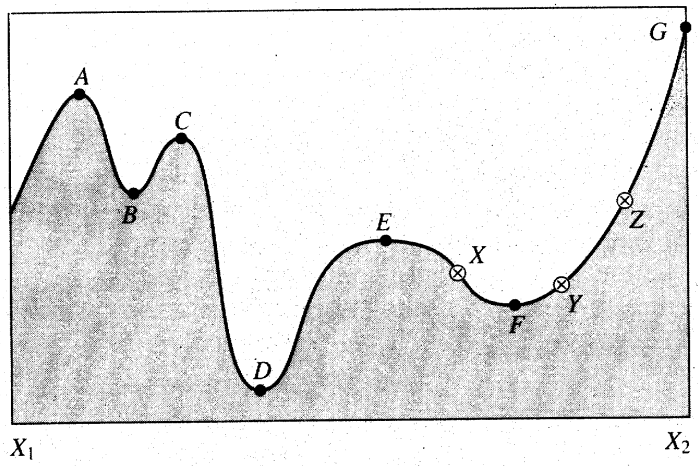


Figure 10.0.1. Extrema of a function in an interval. Points A, C, and E are local, but not global maxima. Points B and F are local, but not global minima. The global maximum occurs at G, which is on the boundary of the interval so that the derivative of the function need not vanish there. The global minimum is at D. At point E, derivatives higher than the first vanish, a situation which can cause difficulty for some algorithms. The points X, Y, and Z are said to "bracket" the minimum F, since Y is less than both X and Z.

Miten suuri tarkkuus void. saavuttaa? Olkoon b minimikohta, jolloin $f'(b) = 0$.

Taylor $\Rightarrow \ f(x) \sim \ f(b) + \frac{1}{2} f''(b)(x - b)^2$

Vaatimus: $|\frac{1}{2}f''(b)(x-b)^2| < \epsilon|f(b)|$

$$\Leftrightarrow \quad |x-b| < \sqrt{\epsilon}\sqrt{\frac{2|f(b)|}{|f''(b)|}} = \sqrt{\epsilon}|b|\sqrt{\frac{2|f(b)|}{|f''(b)||b|^2}}$$

$\epsilon =$ kone-epsilon $\sim 10^{-16}$.

Peukalosääntö. Yo. tarkastelun nojalla NR suosittaa, että valitaan 1-ulotteisessa minimoinnissa tol $\sim \sqrt{\epsilon} \sim 10^{-5}$.

Miten yo. vaiheessa 1) & 2) valitaan uusi piste x?

Kultaisen leikkauksen haku (Fibonacci haku). Merk. $\delta = \frac{3-\sqrt{5}}{2} = 0.38197$.

1) Jos $b-a > c-b$ valit. $x = b - \delta(b-a)$

2) Jos $b-a < c-b$ valit. $x = b + \delta(c-b)$

`NR::mnbrak` s.281 hoitaa minimin rajoittamisen

`NR::golden` s.282 tekee kultaisen leikk.haun

```
// FILE: mygold.cpp begins
//  g++ -Wall mygold.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
#include "nr.h"
using namespace std;

// Driver for routine golden

DP func(const DP x)
{
  return NR::bessj0(x);
}

int main(void)
{
  const DP TOL=1.0e-6,EQL=1.0e-3;
  bool newroot;
```

```
  int i,j,nmin=0;
  DP ax,bx,cx,fa,fb,fc,xmin;
  Vec_DP amin(20);

  cout << "Minima of the function bessj0" << endl;
  cout << setw(10) << "min. #" << setw(9) << "x";
  cout << setw(18) << "bessj0(x)" << setw(13) << "bessj1(x)" << endl;
  cout << fixed << setprecision(6);
  for (i=0;i<100;i++)
  {
    ax=DP(i);
    bx=DP(i+1);
    NR::mnbrak(ax,bx,cx,fa,fb,fc,func);
    NR::golden(ax,bx,cx,func,TOL,xmin);
    if (nmin == 0)
    {
      amin[nmin++]=xmin;
      cout << setw(7) << nmin << setw(16) << xmin;
      cout << setw(13) << NR::bessj0(xmin);
      cout << setw(13) << NR::bessj1(xmin);
      cout << endl;
    }
    else
    {
      newroot=true;
      for (j=0;j<nmin;j++)
        if (fabs(xmin-amin[j]) <= EQL*xmin) newroot=false;
      if (newroot) {
        amin[nmin++]=xmin;
        cout << setw(7) << nmin << setw(16) << xmin;
        cout << setw(13) << NR::bessj0(xmin);
        cout << setw(13) << NR::bessj1(xmin);
        cout << endl;
      }
    }
  }
  return 0;
}
// FILE: mygold.cpp ends
/* Output:
Minima of the function bessj0
    min. #        x         bessj0(x)    bessj1(x)
      1         3.83171    -0.402759  2.84232e-07
      2         10.1735    -0.249705  1.34685e-07
      3         16.4706    -0.196465  2.37059e-07
```

```
...
     14          85.604   -0.0862347  5.51502e-07
     15         91.8875   -0.0832343 -2.19822e-06
     16          98.171   -0.0805267  -4.9987e-07
*/
```

10.2 Parabolinen interpolointi ja Brentin menetelmä. Kultaisen leikkauksen haku toimii kaikissa tilanteissa. "Hyvissä" tilanteissa on mahdollista edetä tehokkaammin käyttäen hyväksi sitä, että ääriarvokohdissa funktio on "parabelin näköinen". Pisteiden $(a, f(a))$, $(b, f(b))$, $(c, f(c))$ kautta kulkevan parabelin ääriarvokohdan abskissa on

$$x = b + \frac{1}{2}\frac{(b-a)^2(f(b)-f(c)) - (b-c)^2(f(b)-f(a))}{(b-a)(f(b)-f(c)) - (b-c)(f(b)-f(a))}. \tag{1}$$

Huomaa kuitenkin, että parabelin ääriarvon laatua (min vai max) pistessä x ei tiedetä.

Idea. Käytetään kaavaa (1), jos se näyttää johtavan hyviin tuloksiin, muuten hidasta mutta varmaa kultaisen leikkauksen hakua.

Mahdollisia vaikeuksia.
(a) Valinta em. kahden strategian välillä voi olla vaikeaa.
(b)"Loppupeli"ehkä vaikea (pyöristysvirheet).
(c) Luokittelun "hyviin"ja "huonoihin"tilanteisiin täytyy olla robusti (toimintavarma).

Brentin menetelmä. Toteuttaa em. ideat: Kussakin vaiheessa pidetään kirjaa kuudesta pisteestä a, b, u, v, w, x, jotka määrit. seur.: funktion minimi on rajoitettu a:n ja b:n väliin; x on piste, jossa funktiolla on pienin arvo tähän asti tutkituista pisteistä; w:ssä funktiolla on toiseksi pienin arvo ja v on w:n edellinen arvo sekä u on piste, jossa funktion arvo laskettiin viimeksi. Lisäksi merk. $x_m = (a+b)/2$. Tilannetta havainnollistavan kuvan merkinnät:

- $1, 2, 3$ alkup.pisteet

- 4 = pisteiden 1, 2, 3 kautta kulkevan parabelin minimikohta
- 5 = pisteiden 1, 4, 2 kautta kulkevan parabelin minimikohta

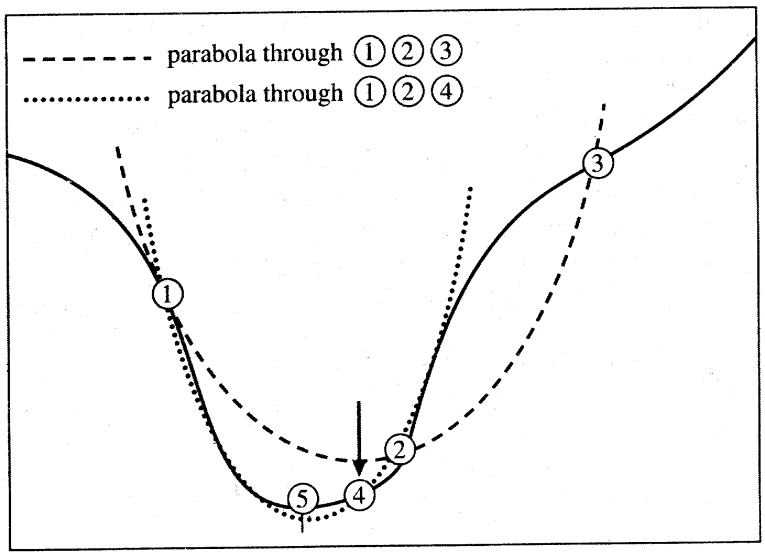


Figure 10.2.1. Convergence to a minimum by inverse parabolic interpolation. A parabola (dashed line) is drawn through the three original points 1,2,3 on the given function (solid line). The function is evaluated at the parabola's minimum, 4, which replaces point 3. A new parabola (dotted line) is drawn through points 1,4,2. The minimum of this parabola is at 5, which is close to the minimum of the function.

Huom. Brentin menetelmä olettaa, että funktio on määritelty *koko* reaaliakselilla. Jos näin ei ole asianlaita, on funktio jatkettava sopivalla tavalla koko reaaliakselilla määritellyksi funktioksi.

NR:n algm:ssa on lisävaatimuksia parabelin käytölle, esim. vaatimus, että sen aiheuttama korjaus on enintään puolet edellisen iteraatiokierroksen korjauksesta. (Tästä seuraa, että parab. käyttö ei estä konvergenssia.)

Algm `NR::brent` s.404

Käytetään myös osana korkeampiulotteisessa minimoinnissa, etsittäessä minimiä suorilla. Näin ollen `NR::brent` on eräs NR:n tärkeimpiä optimointialgoritmeja.

```
// FILE: mybrent.cpp begins
//  g++ -Wall mybrent.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
```

```
#include "nr.h"
using namespace std;

// Driver for routine brent

DP func(const DP x)
{
  return NR::bessj0(x);
}

int main(void)
{
  const DP TOL=1.0e-6,EQL=1.0e-4;
  bool newroot;
  int i,j,nmin=0;
  DP ax,bx,cx,fa,fb,fc,xmin;
  Vec_DP amin(20);

  cout << endl << "Minima of the function bessj0" << endl;
  cout << setw(10) << "min. #" << setw(9) << "x";
  cout << setw(18) << "bessj0(x)" << setw(13) << "bessj1(x)" << endl;
  cout << fixed << setprecision(6);
  for (i=0;i<100;i++) {
    ax=DP(i);
    bx=DP(i+1);
    NR::mnbrak(ax,bx,cx,fa,fb,fc,func);
    NR::brent(ax,bx,cx,func,TOL,xmin);
    if (nmin == 0)
    {
      amin[nmin++]=xmin;
      cout << setw(7) << nmin << setw(16) << xmin;
      cout << setw(13) << NR::bessj0(xmin);
      cout << setw(13) << NR::bessj1(xmin);
      cout << endl;
    }
    else
    {
      newroot=true;
      for (j=0;j<nmin;j++)
        if (fabs(xmin-amin[j]) <= (EQL*xmin)) newroot=false;
      if (newroot) {
        amin[nmin++]=xmin;
        cout << setw(7) << nmin << setw(16) << xmin;
        cout << setw(13) << NR::bessj0(xmin);
        cout << setw(13) << NR::bessj1(xmin);
```

```
        cout << endl;
      }
    }
  }
  return 0;
}
// FILE: mybrent.cpp ends
/* Output:
Minima of the function bessj0
    min. #        x         bessj0(x)    bessj1(x)
      1          3.8317    -0.402759  4.85347e-07
      2         10.1735    -0.249705  1.14457e-07
      3         16.4706    -0.196465  -7.6138e-07
...
     14          85.604   -0.0862347 -2.17754e-08
     15         91.8875   -0.0832343  3.69073e-07
     16         98.1709   -0.0805267  2.66599e-06
*/
```

10.3 1-ulott. haku ja ensimmäiset derivaatat. Yksioikoinen menettely olisi hakea deriv.:n 0-kohdat ja näistä edelleen ääriarvopisteet. Vaikeutena olisi tällöin erottaa maksimit minimeistä ja tästä syystä NR ei sitä suosittele.

NR esittää sen sijaan algoritmin `NR::dbrent`.

Oletetaan, että $a < b < c$ sulkevat minimin.

Jos $f'(b) > 0 \Rightarrow$ haetaan minimiä väliltä (a, b) seuraavasti. ensin aset. b:n ja kahden muun parhaan pisteen kautta parabeli. Parabelin deriv.:n 0-kohta etsitään sekanttimenet. Varmistus kuten Brent.

Jos $f'(b) < 0 \Rightarrow$ haetaan minimiä väliltä (b, c).

Algm `NR::dbrent` s. 406

10.4 Simpleksihakumenetelmä.

Nelder ja Mead 1965

(simpleksi-haku = polytooppihaku = downhill simplex method)

Idea. Työnnetään "kivi" liikkelle laaksoa ympäröivältä harjanteelta. Alaspäin vyöryvä kivi löytää reittinsä matalimman kohdan.

Simpleksihaku-menetelän simpleksi on kiven asemassa, simpleksi tosin muuttaa haun aikana muotoaan kuten "ameeba". Ei tarvita derivaattaa eikä 1-ulotteista minimointia.

Simpleksi tasossa on kolmio. Yleisesti $\mathbb{R}^N$:n simpleksi on monitahokas, jolla on $N+1$ kärkeä. Simpleksihaku menet.:n aloitus vaatii $N+1$ kärkipistettä. Jos yksi näistä on P_0, niin muiksi void. valita $P_0 + \lambda_i e_i$ ($e_i = \mathbb{R}^N$:n yksikkövektori), missä λ_i on skaalaustekijä. Mahdollisesti $\lambda_i = \lambda \ \forall i$.

Menetelmä. Valitaan "lähtösimpleksin" kärjet $x_1, ..., x_{n+1}$ alueelta, jolla minimin ajatellaan sijaitsevan. Merkitään

$f_i = f(x_i)$

$x_h =$ kärki, jossa $f_h = \max\{f_i\}$

$x_l =$ kärki, jossa $f_l = \min\{f_i\}$

$x_0 = \frac{1}{n} \sum_{i \neq h} x_i$ eli huonoimman kärjen x_h vastaisen sivun painopiste.

Kiinnitetään parametrit $\alpha > 0,\ 0 < \beta < 1,\ \gamma > 1$. Toistetaan seuraavia perusoperaatiota:

(1) **Peilaus.** Muodostetaan uusi kärki peilaamalla huonoin piste sen vastaisen sivun suhteen. Merkitään $x_r = (1+\alpha)x_0 - \alpha x_h$.

Jos $f_r > f_i \ \forall i \neq h$ mennään kohtaan (3).

Jos $f_i \leq f_r < f_h$, korvataan x_h x_r:llä ja saadaan uusi simpleksi. Toistetaan peilaus.

(2) **Laajennus.** Jos $f_r < f_l$ niin edetään pitemmälle samaan suuntaan ja merk. $x_e = \gamma x_r + (1-\gamma)x_0$, missä $\gamma > 1$ on ns. laajennuskerroin. Jos $f_e < f_l$, korvataan x_h x_e:llä ja saadaan uusi polytooppi. Jos $f_e \geq f_l$, korvataan x_h x_r:llä (laajennus ei kannata). Palataan (1):een.

(3) **Pienennys.** Jos $f_r < f_h$, korvataan x_h x_r:llä. Merkitään $x_c = \beta x_h + (1-\beta)x_0$, missä $0 < \beta < 1$ on kutistuskerroin. Jos $f_c <$

$\min(f_h, f_r)$, korvataan x_h x_c:llä. Jos $f_c \geq \min(f_h, f_r)$, korvataan jokainen x_i pisteellä $(x_i + x_l)/2$ l. "puolitetaan"simpleksi. Palataan (1):een.

Lopetuskriteeri. Lopetetaan kun simpleksin sivut kyllin pienet tai kun funktion vaihtelu kärjissä on riittävän vähäistä (esim. kun $(\frac{1}{n+1}\sum_{i=1}^{n+1}(f_i - f_0)^2)^{1/2} < \epsilon$.)

Menetelmän yo. kuvaus on monisteesta Neittaanmäki-Mäkelä-Parviainen: Epälineaarinen optimointi (JY, Matem. laitos), jossa on monipuolinen katsaus optimointimenetelmiin. Niin ollen yo. kuvaus ei välttämättä vastaa NR:n algoritmiin `NR::amoeba` implementointia (s.292), mutta antaa kuitenkin yleiskuvan simpleksimenetelmästä (NR ei tässäkään kohdassa kovin tarkkaan selosta algoritmin toimintaa). Algoritmin perusteellinen tarkastelu on esitetty tutkimuksessa Lagarias, Reeds, Wright, Wright, SIAM J. Optim. 9 (1998), 112-147.

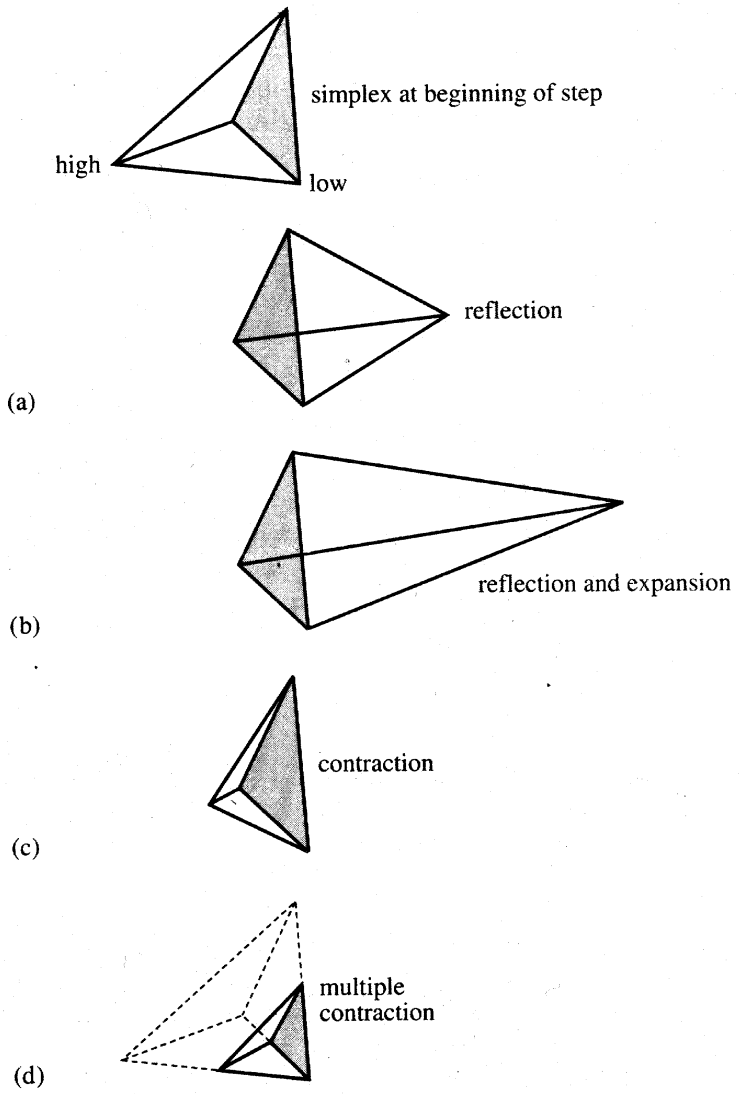


Figure 10.4.1. Possible outcomes for a step in the downhill simplex method. The simplex at the beginning of the step, here a tetrahedron, is shown, top. The simplex at the end of the step can be any one of (a) a reflection away from the high point, (b) a reflection and expansion away from the high point, (c) a contraction along one dimension from the high point, or (d) a contraction along all dimensions towards the low point. An appropriate sequence of such steps will always converge to a minimum of the function.

```
// FILE: myamoeba.cpp begins
// g++ -Wall myamoeba.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
#include "nr.h"
using namespace std;
```

```
// Driver for routine amoeba

DP func(Vec_I_DP &x)
{
  return 0.6-NR::bessj0(SQR(x[0]-0.5)+SQR(x[1]-0.6)+SQR(x[2]-0.7));
}

int main(void)
{
  const int MP=4,NP=3;
  const DP FTOL=1.0e-10;
  int i,nfunc,j;
  Vec_DP x(NP),y(MP);
  Mat_DP p(MP,NP);

  for (i=0;i<MP;i++) {
    for (j=0;j<NP;j++)
      x[j]=p[i][j]=(i == (j+1) ? 1.0 : 0.0);
    y[i]=func(x);
  }
  NR::amoeba(p,y,FTOL,func,nfunc);
  cout << endl << "Number of function evaluations: " << nfunc << endl;
  cout << "Vertices of final 3-d simplex and" << endl;
  cout << "function values at the vertices:" << endl << endl;
  cout << setw(3) << "i" << setw(10) << "x[i]";
  cout << setw(12) << "y[i]" << setw(12) << "z[i]";
  cout << setw(14) << "function" << endl << endl;
  cout << fixed << setprecision(6);
  for (i=0;i<MP;i++) {
    cout << setw(3) << i;
    for (j=0;j<NP;j++) cout << setw(12) << p[i][j];
    cout << setw(12) << y[i] << endl;
  }
  cout << endl << "True minimum is at (0.5,0.6,0.7)" << endl;
  return 0;
}
// FILE: myamoeba.cpp ends

Number of function evaluations: 64
Vertices of final 3-d simplex and
function values at the vertices:

  i      x[i]        y[i]        z[i]      function

  0    0.498932    0.600845    0.700729        -0.4
```

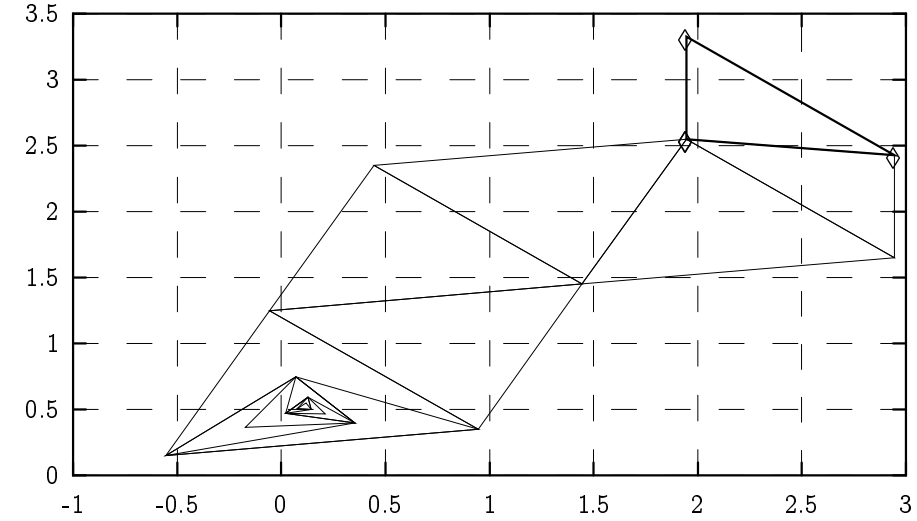
```
  1    0.501374    0.598983     0.70052        -0.4
  2    0.501484    0.599711    0.698687        -0.4
  3    0.498624    0.598268    0.699555        -0.4

True minimum is at (0.5,0.6,0.7)
```

Seuraava ohjelma havainnollistaa simpleksin kulkureittiä. Se on pienin muutoksin sama kuin edellinen ohjelma. Muutokset liittyvät lähinnä piirtämistä tukeviin täydennyksiin ohjelmassa amoeba2.cpp.

```
/* FILE: myamoe2.cpp begins. */
/* Driver for routine amoeba */
/*  g++ -Wall myamoe2.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr  */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#include "amoeba2.cpp"

#define MP 3
#define NP 2
#define FTOL 1e-2


double func(Vec_I_DP &x)
{
   return 2*x[0]*x[0]-2*x[1]+3*x[1]*x[1]-x[1]-x[0]*x[1];
  // nice: return x[0]*x[0]-2*x[1]+2*x[1]*x[1]-x[0]-x[0]*x[1];
}

int main(void)
{
  void amoeba2(Mat_IO_DP &p, Vec_IO_DP &y, const DP ftol,
               DP funk(Vec_I_DP &), int &it );
  int i,nfunc,j;
```

```
  Vec_I_DP  x(NP);
  Vec_DP y(MP);
  Mat_DP p(MP,NP);
  int ITERR=14;
  FILE *fp;
  init_srand();

  for (int k=1;k<=10;k++) /* Iteration with ten different
                          initial simplexes */
    {

  for (i=0;i<MP;i++) {
    for (j=0;j<NP;j++)
     x[j]=p[i][j]=(i == (j+1) ? 1.0 : 0.0)+(3.0*tan(k)+j*rdm(0.1,0.9));
        y[i]=func(x);
  }

  amoeba2(p,y,FTOL,func, nfunc, ITERR);
  printf("\nNumber of function evaluations: %3d\n",nfunc);
  printf("Vertices of final simplex and\n");
  printf("function values at the vertices:\n\n");
  printf("%3s %10s %12s %14s\n\n",
         "i","x[i]","y[i]","function");
  for (int i=1-1;i<=MP-1;i++) {
    printf("%3d ",i);
    for (int j=1-1;j<=NP-1;j++) printf("%12.6f ",p[i][j]);
    printf("%12.6f\n",y[i]);
  }
  fp=fopen("amoplot.cmd","w");
  if(fp) {
    fprintf(fp,"set grid\n");
    fprintf(fp,"set timestamp\n");
    /*  amoeba2 writes amosimp.dat */
    // fprintf(fp,"plot ");
    fprintf(fp,
"plot 'amosimp.dat' notitle w l lw 3, 'amosimp0.dat' notitle w l lw 4, 'amosimp0.dat' not

    fprintf(fp,"pause -1");
    fclose(fp);
    system("gnuplot amoplot.cmd");
  }
  else printf("Cannot open file\n");
  getchar();
  }
}
```

```
/* FILE: myamoe2.cpp ends. */
```



Mon Mar 04 01:04:22 2002

Rajoitetusta optimoinnista.

NR:n eräät juurenhaku- ja minimointialgoritmit edellyttävät, että funktio on määritelty koko $\mathbb{R}$:ssä, ei pelkästään osavälillä. Jos algm käytetään kuitenkin vain osavälillä määriteltyihin funktioihin, niin voidaan joutua virhetilanteisiin.

Esim. Merk. $f(x) = 1/\sqrt{x^3(1-x)},\ 0 < x < 1.$

1) Ratkaise $f(x) = 10,\ 0 < x < 1/4.$

2) Etsi f:n minimi, $0 < x < 1.$

Nämä molemmat ovat esimerkkejä tehtävistä, jotka saattavat johtaa vaikeuksiin, jos NR:n algoritmeja yritetään käyttää ilman esivalmisteluja. Mahdollinen esivalmistelu voisi olla esim. muuttujanvaihto, joka estää argumentin karkaamisen luvattomalle alueelle.

Jos halutaan funktion $z = f(x, y)$ suurin ja pienin arvo joukossa $x_1 \le x \le x_2,\ y_1 \le y \le y_2$ voidaan tehdä apusijoitus $g(x, y) = f(h(x), k(y))$, missä h:n arvoalue on $[x_1, x_2]$ ja k:n $[y_1, y_2]$.

Tähän aihepiiriin liittyy myös NR:n. algm `NR::linmin`, joka minimoi annetun n:nnän muuttujan funktion annetun pisteen P kautta kulkevalla suoralla, jonka suunta on annettu.

Sakkofunktio (penalty function)-menetelmä.

Olkoon $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ jatkuva. Etsitään f:n minimiä $\mathbb{R}^n$:n kompaktissa joukossa K. Jatkossa oletetaan, että int K on alue.

Sakkofunktio-menetelmä yo. rajoitetun minimointitehtävän ratkaisuun perustuu funktion

$$f(x) + g(x)$$

minimointiin ilman rajoituksia, missä $g(x) \to \infty$, kun $x \to \partial K$, ja $g(x) > 0 \forall x \in K$. Selvästi funktion g valinta vaikuttaa ratkaisuun, joten tällä menetelmällä voidaan saavuttaa vain likimääräisiä tuloksia.

Sakkofunktiomenetelmä soveltuu tilanteisiin, joissa K on rakenteeltaan yksinkertainen esim. suorakulmainen särmiö tai $\{x \in \mathbb{R}^n : |x - x_0| < r\}$ (kuula). Näihin tilanteisiin liittyen voidaan sakkofunktio eksplisiittisesti konstruoida. NR:ssä ei sakkofunktiomenetelmää kuitenkaan esitellä eikä käytetä.

Esim. Tunnettu esimerkkifunktio optimointiteoriassa on ns. Rosenbrockin funktio $F(x, y) = 100(y - x^2)^2 + (1 - x)^2$, jonka minimikohta on $(1, 1)$. Jos halutaan f:n minimi joukossa $\{(x, y) : \ x^2 + y^2 \leq \frac{1}{4}\}$ niin void. sakkofunktioksi g valita esim.

$$g(x, y) = \ln \frac{4}{1 - 4(x^2 + y^2)}.$$

Nyt pitää vielä huolehti siitä, että logaritmissa ei tule argumentin virhettä laskennan aikana. (Ns. yleistetty Rosenbrockin funktio on

$$F(x_1, ..., x_n) = 1 + \sum_{i=2}^{n} [100(x_i - x_{i-1}^2)^2 + (1 - x_{i-1})^2].$$

$(x_0 = (\frac{1}{11}, \ \frac{2}{11}, ..., \frac{10}{11}))$

10.5 Suuntajoukko-menetelmät.

N:nnän muuttujan funktio suoralle rajoitettuna on esitettävissä yhden muuttujan funktiona. Näin ollen N:nnän muuttujan funktion pienin arvo suoralla void. löytää aikaisempien menetelmien avulla (jos on olemassa). Tällaiselle algoritmille sopii nimeksi `NR::linmin` (s.419).

Algm `NR::linmin`: Annetulle pisteelle P ja vektorille n on etsittävä $\lambda \in \mathbb{R}$ s.e. $f(P + \lambda n)$ minimoituu.

Korvaa P $P + \lambda n$:llä.

Tällaista minimoivaa pistettä $P + \lambda n$ kutsutaan f:n (P, n) -*minimiksi* l.*minimiksi suuntaan* n pisteestä P.

Huom. `NR::linmin` vastakkaisiin suuntiin tuottaa saman uuden pisteen $P + \lambda n$, ts. λ voi olla < 0.

Monet minimointialgoritmit käyttävät osanaan `NR::linmin`:in kaltaista 1-ulott. minimointia sopivasti valituissa suunnissa. Pääasiallinen ero eri minimointimenetelmissä on juuri suuntien valintamenettelyssä, jossa voidaan mm. käyttää hyväksi aikaisemmin laskettuja funktion tai sen gradientin arvoja jne.

Eräs yksinkertainen menetelmä on käyttää yksikkövektorien suuntia $e_1, ..., e_N$, mutta tämä on tavallisesti hidasta. Muut suuntia käyttävät menetelmät pyrkivät parempaan suuntajoukkoon kuin $\{e_i\}$ käyttämällä laskennan aikana kertynyttä tietoa funktion käyttäytymisestä.

Liittosuuntamenetelmä (l. konjugoitujen suuntien menet.)

Jos funktio f saavuttaa pienimmän arvonsa suoralla pisteessä P_0, niin tällöin $(\nabla f)(P_0) \perp$ suora (muuten funktion deriv. suoran suuntaan $\neq 0$ k.o. pisteessä, joka olisi ristiriidassa P_0:n minimiominaisuuden kanssa).

Taylor-kehitelmä voidaan kirjoittaa seuraavasti

$$f(P + x) = f(P) + \sum_i \frac{\partial f}{\partial x_i} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial f^2}{\partial x_i \partial x_j} x_i x_j + ...$$

$$\approx c - b \cdot x + \frac{1}{2} x \cdot A \cdot x$$

missä

$$c = f(P),\ b = -\nabla f|_P,\ A_{ij} = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}|_P$$

matriisia A kutsutaan f:n *Hessen matriisiksi* pisteessä P.

Välttämätön ehto ääriarvolle pisteessä P on $\nabla f|_P = 0$, joten minimipisteen läheisyydessä f:ää approksimoi $f(P)+$ kvadraattinen termi joka riippuu Hessen matriisista. Sanotaan, että u ja v ovat toistensa *liittosuuntia* l. *kongujoituja suuntia,* jos pätee

$$0 = u \cdot A \cdot v \quad (u \text{ ja } v \text{ liittosuuntia})$$

Powellin menetelmä

Aloitus: $u_i = e_i,\ i = 1, ..., N$.

Toistetaan seuraavaa proseduuria niin kauan kuin funktion arvot vähenevät

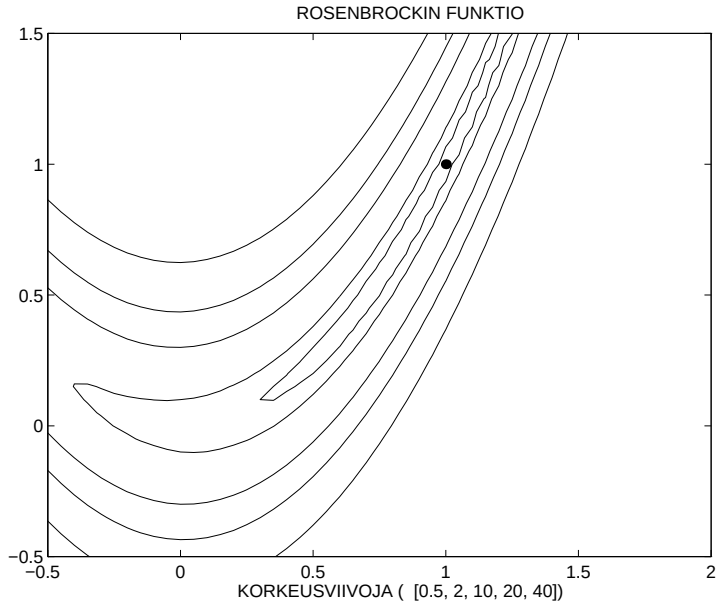
- Talleta alkupiste P_0
- Kun $i = 1, ..., N$ etene P_{i-1}:stä (P_{i-1}, u_i)-minimiin P_i
- Kun $i = 1, .., N-1$ aseta $u_i \leftarrow u_{i+1}$.
- Aseta $u_N = P_N - P_0$.
- Etene P_N:stä (P_N, u_N)-minimiin, merk. tätä pistettä P_0:lla.

Powell osoitti v. 1964 että kvadraattiselle funktiolle A yo. proseedurin k iteraatiota tuottavat vektorijoukon, jonka k viimeistä vektoria ovat keskenään konjugoituja ts. $u \cdot Av = 0$. Voidaan osoittaa, että yo. algm N kertaa toteutettuna minimoi N:n muuttujan kvadraattisen funktion (kullakin iteraatiokierroksella tehdään $N + 1$ `NR::linmin`–kutsua).

Kokemus on osoittanut, että Powellin algoritmin tuottamalla vektorijoukolla on taipumus surkastua niin, että muodostuukin lähes lineaarisesti riippuva vektorijoukko. Surkastumista voidaan yrittää torjua esim. seuraavin tavoin.

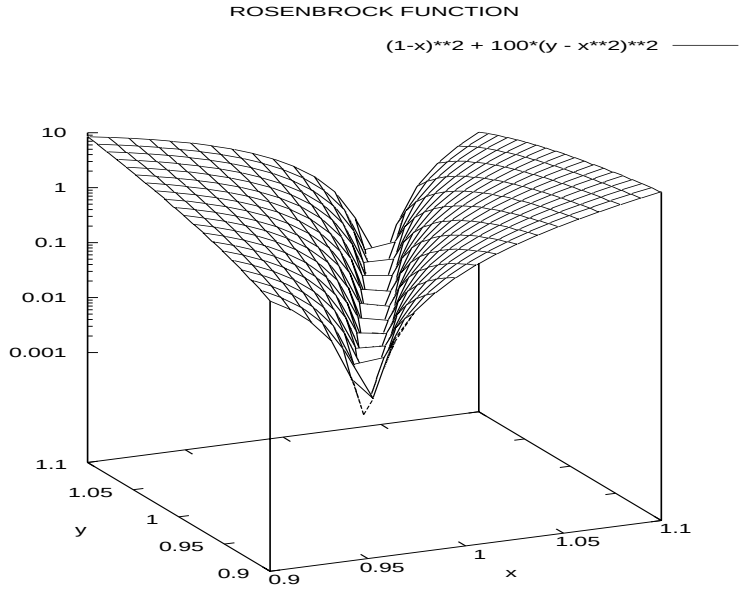
1. Kun algoritmi on toteutettu N t. $N + 1$ kertaa asetetaan uudelleen $u_i = e_i$.

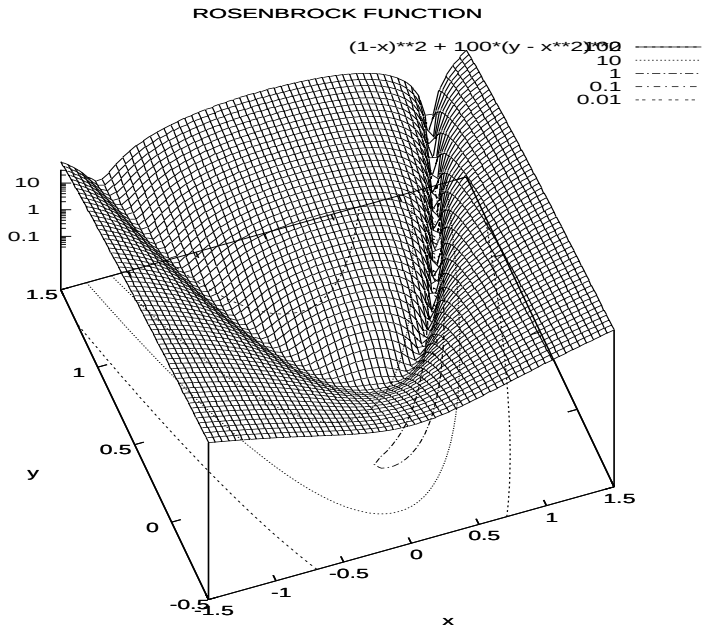
2. Voidaan valita muutamia hyviä suuntia N:n konjug. suunnan asemasta.



Minimien geometriaa

Oheisessa kuvassa on kahden muuttujan reaaliarvoisen funktion nivookäyriä. Funktion minimi sijaitsee ”banaanilaakson”pohjalla.





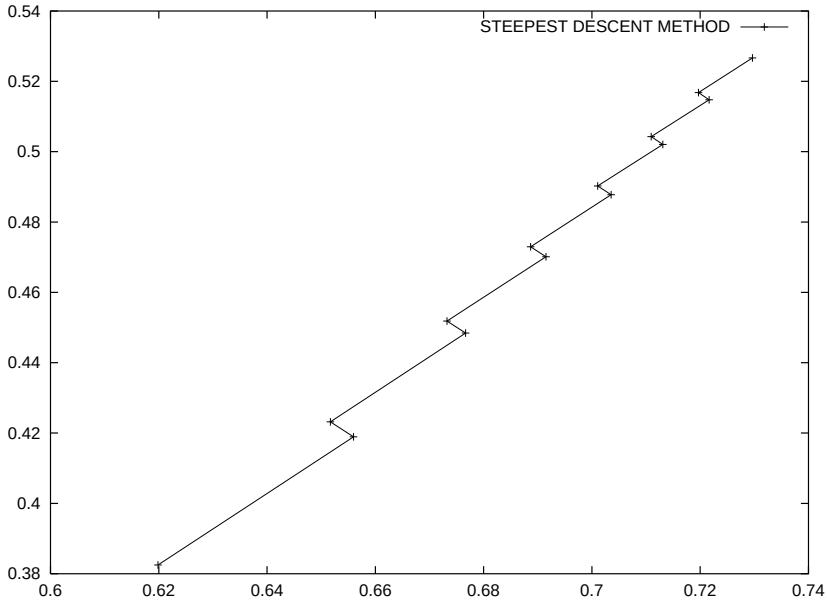
Funktion voimakkaimman kasvun suunta on ∇f ja voimakk. vähenemisen suunta $-\nabla f$. (vrt. 1-ulott. tapaus). Jos P:n kautta käyvän nivookäyrän tangentin suunta P:ssä on t, niin $t \cdot \nabla f = 0$ (seuraa nivookäyrän määritelmästä). N-ulott. tapauksessa nivoopinnalla on vastaava ominaisuus.

Funktion minimointi voidaan periaatteessa suorittaa seuraavalla Cauchyn esittämällä *jyrkimmän laskeuman (t. suunnan)* menetelmällä (*gradienttimenetelmä*, steepest descent method)

1. Valitaan alkupiste P_0 ja tehdään `NR::linmin` suuntaan $-\nabla f|_{P_0}$ ja saadaan piste P_1.

2. Jos $|P_0 - P_1| >$ tol aset. $P_0 \leftarrow P_1$ ja toistetaanaskel 1. Muuten lopetus.

Voidaan osoittaa, että gradienttimenet. suppenee aina kun alkuarvaus on kyllin lähellä minimiä. Konvergenssi voi tosin "banaanilaakson"tyyppisissä tilanteissa olla piinallisen hidasta (menetelmän kulkema reitti muodostaa sik-sakkia). Ks. www-sivun ohjelma `mysteep5.cpp` .



Olkoon f funktio, jolla on 1-käsitt. minimi 0:ssa ja joukko $\{z \in \mathbb{R}^n : |f(z)| \leq 1\}$ on rajoitettu. Oletamme, että jollakin menetelmällä on generoitu pisteistö p_k s.e. $p_k \to p_0$, $f(p_k) \to f(p_0)$ ja $f(p_{k+1}) < f(p_k)$ kaikilla $k = 1, 2, ...$ On huomattava, että tällöin voi olla $f(p_0) > f(0)$ ts. p_0 ei ole minimipiste. (Näin on esimerkiksi jos valit. $p_0 \neq 0$ s.e. $f(p_0) > f(0)$ ja jono $p_k \to p_0$ s.e. $f(p_k) > f(p_{k+1})$.

Minimointimenetelmiä, joissa $f(p_{k+1}) < f(p_k)$ toteutuu kutsutaan *laskevien suuntien menetelmiksi.*

Powellin menetelmän modifikaatio

Kuten edellä mainittiin, Powellin menetelmässä voi esiintyä generoitujen suuntien luhistumisilmiö ts. niiden muodostama joukko tulee (lähes) lineaarisesti riippuvaksi. Tämä ikävä ilmiö aiheuttaa komplikaatioita algoritmin toimintaan. Komplikaatioita voidaan yrittää hoitaa modifioimalla Powellin menetelmää seuraavasti.

- Jätetään pois se suunta, johon funktio eniten vähenee, otetaan $P_N - P_0$ edelleenkin mukaan.

Heuristinen perustelu: Em. suunta on luultavasti lähellä $P_N - P_0$:aa, joten sen poisjättö toivottavasti vähentää suuntien "yhteenluhistumista".

-Poikkeus yo. sääntöön: Uutta suuntaa $P_N - P_0$ ei oteta mukaan suuntajoukkoon vaan pidet. edelliset suunnat, jos joko (a) tai (b) toteutuu. Merk.

$$f_0 = f(P_0),\ f_N = f(P_N),\ f_E = f(2P_N - P_0)$$

$$\nabla f = \max\{(\nabla f)_i\},\ (\nabla f)_i = |f(P_i) - f(P_{i-1})|$$

(a) $f_E \geq f_0$

(b) $2(f_0 - 2f_N + f_E)[(f_0 - f_N) - \nabla f]^2 \geq (f_0 - f_N)^2 \nabla f$

Perusteluja:

Tapauksessa (a) uuteen suuntaan $P_N - P_0$ eteneminen pisteestä P_N ei näytä johtavan funktion arvojen pienenemiseen. Kriteerille (b) on kirjassa esitetty perusteluja (s. 299).

```
// FILE: mypowell.cpp begins
//  g++ -Wall mypowell.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.cpp"

//const int NDIM=7;

Vec_DP  truemin(1);

// Driver for routine powell

DP func(Vec_I_DP &x)
{
  int n=x.size();
  DP t=SQR(x[0]-truemin[0]);
  for (int i=1;i<n;i++) t+= SQR(x[i]-truemin[i]);
  return 1.0+t; //-NR::bessj0(t);
```

```
}

int main(void)
{
  const DP FTOL=1.0e-6;
  int iter;
  DP fret;

  init_srand();
  const int NDIM=(int)rdm(3.0,7.0);
  Vec_DP p(NDIM);
  truemin=p;
  for (int i=0;i<NDIM;i++)
{    truemin[i]=2.0*rdm(0.2, 1.8);
 p[i]=truemin[i]+5.0*rdm(0.2 , 2.0);}
  cout<<"Iterations started at: \n"<<p<<endl;
  Mat_DP xi(NDIM,NDIM);
  for (int i=0;i<NDIM;i++)
    for (int j=0;j<NDIM;j++)
      xi[i][j]=(i == j ? 1.0 : 0.0);
  NR::powell(p,xi,FTOL,iter,fret,func);
  cout << "Iterations: " << iter << endl << endl;;
  cout << "Minimum found at: " << endl;
  cout << fixed << setprecision(6);
  for (int i=0;i<NDIM;i++) cout << setw(12) << p[i];
  cout << endl << endl << "Minimum function value = ";
  cout << setw(12) << fret << endl << endl;
  cout << "True minimum of function is at:" << endl;
  cout << truemin<<endl;
  return 0;
}
// FILE: mypowell.cpp ends
Iterations started at:
      10.54074 10.867299 11.819706 11.198338 4.0820065

Iterations: 1

Minimum found at:
     3.56817       2.078     2.47333     1.29719     1.99635

Minimum function value =            1

True minimum of function is at:
     3.5681672 2.0780049 2.4733272 1.2971873 1.9963494
```

10.6 Liittogradientti- l. konjugaattigradienttimenetelmä

Kaksi yksioikoista funktion minimointitapaa, joissa kummassakin on osana 1- ulott. miniminhaku, ovat

a) minimointi koord. akselien suunnissa, muuttuja kerrallaan

b) jyrkimmän laskeuman menetelmä (Cauchy)

Kokemus on osoittanut b):n varsin tehottomaksi ja näin ollen NR ei esitä sille omaa algoritmia.

Aikaisemmin todettiin: Jos P on f:n (P_0, n)-minimi, niin $n \cdot (\nabla f)(P) = 0$. Erityisesti tämä pätee (b) tapauksessa. Siis molemmissa tapauksissa (a) ja (b) kaksi peräkk. `NR::linmin`:iä suoritetaan suuntiin, jotka kohtisuoria toisiaan vastaan.

Näitä menetelmiä voidaan pyrkiä tehostamaan valitsemalla uusi suunta s.e. se on $\perp$ mahdollisimman montaa aikaisempaa suuntaa vastaan. Samantapainen idea esiintyy lin.algebrasta tunnetussa Gram-Schmidtin ortogonalisointi-menetelmässä. Tähän filosofiaan pohjautuvia minimointimenetelmiä: kutsutaan *liittogradientti* l. *konjugaatti-gradientti-menetelmiksi*. NR esittelee näistä *Fletcherin-Reevesin* ja *Polakin-Ribieren* menetelmät.

Jatkossa oletetaan, että

$$f(x) \approx c - b \cdot x + \frac{1}{2} x \cdot Ax \ (b = -\nabla f) \tag{1}$$

2. **Lause** Olkoon A symmetrinen pos. def. $n \times n$ matriisi, $g_0 \in \mathbb{R}^n$ mielivaltainen ja $h_0 = g_0$. Kun $i = 0, 1, 2, \ldots$ niin määritellään

$$g_{i+1} = g_i - \lambda_i A h_i, \ h_{i+1} = g_{i+1} + \gamma_i h_i \tag{3}$$

missä vakiot $\lambda_i, \ \gamma_i$ valitaan s.e. $g_{i+1} \cdot g_i = 0$ ja $h_{i+1} \cdot Ah_i = 0$ eli

$$\lambda_i = \frac{h_i \cdot g_i}{g_i \cdot Ah_i}, \ \gamma_i = \frac{g_{i+1} \cdot Ah_i}{h_i \cdot Ah_i} \tag{4}$$

(jos nimittäjä $= 0$ niin asetetaan vakiot $= 0$). Silloin

$$g_i \cdot g_j = 0,\ h_i \cdot Ah_j = 0\ i \neq j\,. \tag{5}$$

Tod. Sivuutetaan.

Lauseen 2 nojalla nähdään, että jos *kaksi perättäistä* vektoria ovat konjugoituja (ts. $h_{i+1} \cdot Ah_i = 0$) tai kohtisuoria niin em. prosessin tuottamissa jonoissa samat ominaisuudet periytyvät koko jonoon.

Kaavojen (4) nojalla saadaan (HT)

$$\gamma_i = \frac{g_{i+1} \cdot g_{i+1}}{g_i \cdot g_i} = \frac{(g_{i+1} - g_i) \cdot g_{i+1}}{g_i \cdot g_i} \tag{6}$$

$$\lambda_i = \frac{g_i \cdot h_i}{h_i \cdot Ah_i}. \tag{7}$$

Johtopäätös: Jos matriisi A tunnetaan, niin kaavojen (3), (4) määrittelemä rekursio tuottaa jonon konjugoituja suuntia, joita käytetään peräkkäisissä `NR::linmin`:eissä. Kun on tehty N kpl `NR::linmin`:ejä löydetään minimi kvadraattisen kohdefunktion tapauksessa (sama seikka mainittiin jo Powellin menetelmän yhteydessä edellä). Huomaa kuitenkin, ettei matriisia A tunneta, jos f on eälineaarinen.

8. **Lause.** Olkoot g_i ja h_i konstruoituja kuten kaavoissa (3) ja (4). Oletetaan, että $g_i = -\nabla f(P_i)$, missä f:llä Taylor-kehitelmä (1), ja että pisteestä P_i edetään f:n (P_i, h_i) -minimiin P_{i+1} ja merk. $g_{i+1} = -\nabla f(P_{i+1})$. Silloin g_{i+1} on sama kuin (3):n antama g_{i+1}.

Huom. Lauseen 8 tilanteessa g_{i+1} konstruoitiin tuntematta A:ta.

Tod. Sivuutetaan (kirjan todistus kovin heuristinen).

Lause 8 antaa algoritmin suuntien konstruoinnille, joka ei vaadi Hessen matriisin A tuntemista. Suuntajonon h_i konstruointiin tarvitaan vain `NR::linmin`:iä ja gradientin määrityksiä sekä viimeisempien g_i:den varastointia.

Kaikki yllä sanottu soveltuu NR:n molempiin liittogradienttimenetelmiin sekä Fletcher-Reeves että Polak-Ribieren menetelmään.

Ainoa ero näissä menet. on, että FR käyttää kaavan (6) ensimm. yhtälöä, PR taas jälkimm. yhtälöä γ_i:n laskemiseen. Vaikka ne algebrallisesti ovat samoja, laskennallisesti PR on osoittautunut käytännössä paremmin toimivaksi.

Algm `NR::frprmn` s.423.

Liittogradientti-menetelmällä on sovelluksia harvojen yhtälöryhmien ratkaisuun (`NR::linbcg`).

`NR::linmin` ei vaadi derivaattaa, mutta jos derivaattaa käytetään `NR::frprmn`:n yhteydessä, jossa joka tapauksessa tarvitaaan gradienttia, niin tällöin olisi luontevaa käyttää `NR::linmin`:in sellaista versiota, jossa myös on derivaatta mukana (s.424).

10.7 Kvasi-Newton menetelmät

Kvasi-Newton (muuttuvan metriikan, variable metric) menetelmien tavoite on sama kuin liittogradienttimenetelmillä, nimitt. tiedon kerääminen minimoitavasta funktiosta siten, että N peräkkäistä `NR::linmin`:iä johtaa N:n muuttujan kvadraattisen funktion tapauksessa minimiin.

Muistitilan tarve $N \times N$. Eri variantteja:

Davidon-Fletcher-Powell (DFP)

Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BF65)

Idea: Yritetään löytää jono matriiseja H_i s.e. $H_i \to H = A^{-1}$.

Olk. $f(p+x) \approx f(p) - b \cdot x + \frac{1}{2} x \cdot Ax$, $b = -\nabla f(p)$. Minimipisteessä $x_m = p$ pätee

$$Ax_m = b \tag{1}$$

ja piste x_i tot.

$$Ax_i = \nabla f(x_i) + b \tag{2}$$

(1)& (2) $\Rightarrow$

$$x_m - x_i = A^{-1}[-\nabla f(x_i)]. \tag{3}$$

Jos A^{-1} tunnettaisiin, päästäisiin kaavalla (3) pisteestä x_i suoraan minimiin. Mutta miten löydetään A^{-1} tai sen approksimaatio?

(3) $\Rightarrow$

$$x_{i+1} - x_i = A^{-1}[\nabla f_{i+1} - \nabla f_i],\ \nabla f_i = \nabla f(x_i)$$

Jos H_{i+1}on A^{-1}:n likiarvo niin halutaan

$$x_{i+1} - x_i = H_{i+1}(\nabla f_{i+1} - \nabla f_i).$$

Menetelmien ideana on etsiä H_{i+1}:tä muodossa H_i+ korjaus.

Korjaustermin lauseke DFP:ssä ja BFGS:ssä hieman erilainen.
Algm `NR::dfpmin` s. 428

10.8 Lineaarinen ohjelmointi ja simpleksialgoritmi

Lin. ohjelmointi on synonyymi lin. optimoinnille. Lin. optimoinnin perustehtävä on, kuten alan nimestäkin ilmenee, tutkia lin. funktioiden ääriarvoja. Tehtävän standardimuoto on maksimoida lineaarinen funktio

(1) $$z = a_{01}x_1 + ... + a_{0N}x_N$$

primaariehdoin

(2) $$x_i \geq 0,\ i = 1, ..., N$$

ja samanaikaisin lisäehdoin, joita $M = m_1 + m_2 + m_3$ kpl

(3) $$a_{i1}x_1 + ... + a_{iN}x_N \leq b_i, i = 1, ..., m_1,$$

(4) $$a_{j1}x_1 + ... + a_{jN}x_N \geq b_j(\geq 0),\ j = m_1 + 1, ..., m_1 + m_2,$$

(5) $$a_{k1}x_1 + ... + a_{kN}x_N = b_k,\ k = m_1 + m_2 + 1, ..., m_1 + m_2 + m_3.$$

Yhteensä $M+N$ ehtoa (2)-(5), jotka määritt. "simpleksin"tai monitahokkaan R^N:ssä. Sallitaan $a_{ij} < 0, = 0, > 0$. Ehto $b_i \geq 0$ on tehty mukavuussyistä, se on normalisointi johon päästään aina tarvittaessa kertomalla -1:llä. Ei ole merkitystä sillä onko $M < N, M = N$, vai $M > N$.

Vektori $x = (x_1, ..., x_N)$, joka tot. ehdot (2)-(5), on nimeltään *käypä vektori* ja maksimoitava funktio (1) on *kohdefunktio* (kuten aikaisemminkin). Kohdefunktion maksimoiva käypä vektori on *optimaalinen käypä vektori*. Optim. käypää vektoria ei löydy, jos (i) käypiä vektoreita ei ole ollenkaan (ts. rajoitukset yhteensopimattomia) tai jos (ii) maksimia ei ole ts. on olemassa suunta, jossa muuttujat x_i voivat kasvaa $+\infty$:een s.e. ehdot toteutuvat, jolloin myös kohdefunktio $\to +\infty$. Jos ratkaisu on olemassa, niin se ei yleensä ole 1-käsitt. Erityisesti seuraavissa tapauksissa ratkaisun ei tarvitse olla yksikäsitteinen: jos

(1) kohdefunktio ei rajoitettu,
(2) ehdot ristiriitaisia ts. ratkaisua ei ole olemassa,
(3) ratkaisu saavutetaan simpleksin kärkipisteessä,
(4) ratkaisujoukko on simpleksin sivu.

Rajoituksista seuraa, että käyvät vektorit ovat rajoite-ehtojen määrittelemässä simpleksissä.

Tarkastellaan jatkossa seuraavaa ongelmaa:

$$\text{maksimoi } z = x_1 + x_2 + 3x_3 - \frac{1}{2}x_4 \tag{6}$$

kun $x_i \geq 0,\ i = 1, ..., 4$ ja

$$\begin{cases} x_1 + 2x_3 \leq 740 \\ 2x_2 - 7x_4 \leq 0 \\ x_2 - x_3 + 2x_4 \geq \frac{1}{2} \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 9 \end{cases} \tag{7}$$

Ratkaisuvektori on $x_1 = 0, x_2 = 3.33, x_3 = 4.73, x_4 = 0.95$ kuten myöhemmin tullaan näkemään.

Ratkaisuun edetään vaiheittain.

Alustavia huomautuksia. Koska kohdefunktio on lin. niin optimaalinen käypä vektori on simpleksin (7) reunalla. (Jos näin ei olisi, niin voitaisiin kohdefunktion gradientin suuntaan etenemällä kasvattaa kohdefunktiota.) Optimaalisen käyvän vektorin määrittelee N koordinaattia, joten sen täytyy toteuttaa N kpl ehdoista (2)-(5) s.e. $=$ pätee. Sanotaan, että käypä vektori on *käypä perusvektori*

(feasible basic vector), jos se toteuttaa N kpl ehdoista (2)-(5) s.e. $=$ pätee. Jos $N > M$ niin käyvällä perusvektorilla on ainakin $N - M$ kpl komponenteista $= 0$ (muita ehtoja kuin (2) oli vain M kpl). Huomaa: Käyvän perusvektorin komponenteista enint. M kpl $\neq 0$.

Lin.ohjelmoinnin peruslause. (LOP) Jos on olem. optim. käypä vektori niin on olem. käypä perusvektori, joka on optim.

LOP palauttaa perusongelman (1) kombinatoriseen ongelmaan: Mitkä N kpl rajoituksista (2)-(5) (yhteensä $M + N$ kpl) ovat ne, jotka liittyvät optim. käypään perusvektoriin?

Eri mahdollisuuksia kokeilemalla ja sijoittamalla kohdefunktioon (1) void. maksimointi (periaatteessa) suorittaa. Laskutoimitusten määrä kasvaa kuitenkin rajusti N:n mukana (esim. jos rajoite-ehdot määräävät suorakulmaisen särmiön $\mathbb{R}^N$:ssä, niin kärkipisteitä on 2^N, ts. vaativuus kasvaa vähintään eksponentiaalisesti).

Simpleksimenetelmä (Dantzig 1948) (1):n ratkaisemiseksi perustuu kokeilun organisointiin siten, että

(a) kokeillaan joukkoa kombinaatioita s.e. kohdefunktio kasvaa joka askeleella

(b) optim. käypä ratkaisu saavutetaan "yleensä"enint. $\max\{M, N\}$ askeleella.

Ominaisuuden (b) todistus: 1982 S. Smale.

Simpleksimenetelmää käsittelevä kirjallisuus on laajaa, esim. mainittakoon H. A. Taha: Operations research, Macmillan 1992.

Simpleksimenet. rajoitetulle normaalimuot. tehtävälle

LO-ongelma (1) on *normaalimuodossa*, jos ehtoja (3) ja (4) ei ole vaan ainoat rajoitukset ovat ei-neg. ehto (2) ja yhtälöt (5), ts. $m_1 = m_2 = 0$.

Rajoitettu normaalimuoto: Vaadit. lisäksi että kussakin yhtälössä (5) on ainakin yksi muuttuja *posit.* kertoimella ja ettei se esiinny muissa rajoite*yhtälöissä* (5). Tällöin kukin yhtälöistä (5) void. ratk. ko. muuttujan suhteen. Näin valittuja muuttujia kutsutaan *perusmuuttujiksi* tai vasemman puolen muuttujiksi. Näitä on $M (= 0 + 0 + m_3 = m_3)$ kpl. Muita muuttujia (oikeanpuoleisia muuttujia)

on $N - M$ kpl. Rajoitettu normaalimuoto voidaan saavuttaa vain jos $M \leq N$ kuten jatkossa oletetaan.

Myöhemmin osoitetaan miten jokainen LO-ongelma voidaan palauttaa rajoitettuun normaalimuotoon (mm. muuttujien lukumäärää joudutaan mahdollisesti keinotekoisesti lisäämään).

Kun perusmuuttujat ratkaistaan rajoiteyhtälöistä (5) ja oikeanpuol. muuttujat aset. $= 0$ niin saadaan heti eräs rajoitetussa normaalimuodossa olevan tehtävän käypä perusvektori (jonka ei tarvitse olla optimaalinen)

Esim. Maksimoi $z = 2x_2 - 4x_3$ $(x_i \geq 0)$ rajoiteyhtälöin

$$\begin{cases} x_1 = 2 - 6x_2 + x_3 \\ x_4 = 8 + 3x_2 - 4x_3. \end{cases}$$

$x_1,\ x_4$ perusmuuttujat

$x_2,\ x_3$ oikeanpuoleiset muuttujat

Tehtävä taulumuodossa:

		x_2	x_3	
z	0	2	-4	
x_1	2	-6	1	
x_4	8	3	-4	

Edetään neljässä askeleessa.

1) **Askel 1** Etsitään ne z-rivin alkiot, joissa positiivinen kerroin. Jos tällaista positiiviseen alkioon liittyvää oikeanpuoleista muuttujaa kasvatetaan, niin myös kohdefunktio kasvaa.

2) **Askel 2** Pivotin valinta. Tutkitaan edellä valittujen oikeanpuoleisten muuttujien sarakkeita yo. taulussa. Etsitään vastausta kysymykseeen: Paljonko tällaista valittua oikeanpuoleista muuttujaa voidaan kasvattaa (kun muut oikeanpuol. muuttujat $= 0$) ennen kuin jonkin vas. puolen muuttuja tulee negatiiviseksi (mikä on kiellettyä (2):n nojalla). Jos kaikki kertoimet > 0 ko. oikeanpuol. muuttujan sarakkeessa niin kohdefunktio ei ole rajoitettu ja maksimia ei ole ($\Rightarrow$ done), Jos taas ko. oikeanpuoleisen muuttujan

sarakkeessa on yksi tai useampia negat. alkioita, niin on tutkittava, mikä tällaisista ensimmäiseksi rajoittaa ko. sarakkeen oik.puol. muuttujan kasvua. Rajoitus ko. oik.puolen muuttujan kasvulle saadaan osamäärästä:

$$\frac{\text{ko. vaakarivin vakiosarakkeen luku}}{\text{ko. oikeanpuol. muuttujan kerroin (ko. vaakarivillä)}}$$

Ko. oikeanpuoleisen muuttujan sarakkeen pienin näin saatu osamäärä antaa tiukimman rajoitteen r_j. Ko oikeanpuol. muuttujan kohdefunktion aiheuttama kasvu on $r_j \times z$-rivin ko. alkio. Toistetaan tämä kaikille sell. oikeanpuol. muuttujille, joille z-rivin kerroin > 0. Näistä suurimman kasvun kohdefunktioon antava on "pivotti".

Yo. esimerkin tapauksessa ainoa negatiivinen kerroin x_2:n sarakkeessa on -6, joka sallii x_2:n kasvaa $2/6$:ksi, mikä puolestaan antaa kohdefunktioon kasvun $2 \times 2/6 = 2/3$.

3) **Askel 3** Pivot informaation käyttö. Ratk. pivot alkiota vast. yhtälö (toteutetaan kasvatus)

$$x_1 = 2 - 6x_2 + x_3 \Rightarrow x_2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{6}x_1 + \frac{1}{6}x_3.$$

Seuraavaksi sijoitetaan tämä z-riviin

$$z = 2x_2 - 4x_3 = 2(\frac{1}{3} - \frac{1}{6}x_1 + \frac{1}{6}x_3) - 4x_3 = \frac{2}{3} - \frac{1}{3}x_1 - \frac{11}{3}x_3$$

sekä muihin vas.puolen muuttujien riveihin (esimerkin tapauksessa vain x_4-rivi). Saadaan uusi taulu

		x_1	x_3	
z	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{11}{3}$	
x_2	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	
x_4	9	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{7}{2}$	

4) **Askel 4** Toisto. Toistetaan yo. menettely ja yritetään kasvattaa kohdefunktiota (toistetaan kunnes kaikki z-rivillä olevat oikean

puoleisten muuttujien kertoimet < 0, joka osoittaa, ettei enää voida kasvattaa). Yo. esim. tapauksessa näin on jo asianlaita ja vastaus on:

z:n maksimi on $\frac{2}{3}$, jonka antaa

$x_1 = x_3 = 0,\ x_2 = \frac{1}{3},\ x_4 = 9.$

Huom. Kun $n = 2$ voidaan LO-ongelmia ratkaista myös graafisesti. Esim. Maksimoi $x_1 + x_2$ kun $x_1, x_2 \geq 0$ ja $\begin{cases} x_1 + 3x_2 \leq 5 \\ 2x_1 + x_2 \leq 3 \end{cases}$

$-\frac{1}{3}x_1 + \frac{5}{3} = -2x_1 + 3$

$\frac{5}{3}x_1 = \frac{4}{3} \Rightarrow\ x_1 = \frac{4}{5}$

$\Rightarrow x_2 = -\frac{8}{5} + 3 = \frac{7}{5}$

$x_1 + x_2 = \frac{4}{5} + \frac{7}{5} = \frac{11}{5}$

Kertausta: LO ja simpleksialgoritmi

Teht. Maksimoi

(1) $$z = a_{01}x_1 + ... + a_{0N}x_N \text{ (kohdeftio)}$$

kun

(2) $$x_1 \geq 0, ..., x_N \geq 0$$

ja samanaik. toteutuvat seur. $M = m_1 + m_2 + m_3$ ehtoa

(3) $$a_{i1}x_1 + ... + a_{iN}x_N \leq b_i,\ (b_i \geq 0)\ i = 1, ..., m_1,$$

(4) $$a_{j1}x_1 + ... + a_{iN}x_N \geq b_j,\ j = m_1 + 1, ..., m_1 + m_2,$$

(5) $$a_{k1}x_1 + ... + a_{kN}x_N = b_k,\ k = m_1 + m_2 + 1, ..., m_1 + m_2 + m_3$$

$x = (x_1, ..., x_N)$ on *käypä* vektori, jos se tot. (2)-(5).

Normaalimuoto: $m_1 = m_2 = 0$.

Rajoitettu norm.muoto: $m_1 = m_2 = 0$ ja lisäksi kukin yhtälöstä (5) sisältää vähintään yhden muuttujan posit. kertoimella, joka ei esiinny muissa yhtälöissä ($\Rightarrow M \leq N$). Tällaisia muuttujia sanotaan *perusmuuttujiksi* l. *vas.puolen muutt.*

Esim. Maksimoi $z = 2x_2 - 4x_3,\ x_i \geq 0$, kun

$x_1 = 2 - 6x_2 + x_3$

$x_4 = 8 + 3x_2 - 4x_3$

Sama taulumuodossa:

		x_2	x_3	
z	0	2	-4	
x_1	2	-6	1	
x_4	8	3	-4	

Simpleksialgoritmi rajoitetulle normaalimuotoiselle tehtävälle

4. vaihetta:

1. **Vaihe** z-rivin posit. kertoimien valinta [Millä oikean puolen muuttujilla on kasvattavaa vaikutusta kohdefunktioon?]

2. **Vaihe** Pivotin (l. navan) valinta

Tutkitaan ed. valittujen (posit. kertoimisten) muuttujien vaikutus kohdeftion rajoite-ehtojen vallitessa ja etsitään eniten vaikuttava seuraavasti. Kiinnitetään oikean puolen muuttuja x_j. Etsitään x_j:n maksim. arvo "kasvatusraja"asettamalla muut x_i:t $= 0$ (löydetään tutkimalla x_j-sarakkeen alla olevien negat. lukuja vastaavia rivejä: pienin näin lyödetty raja on x_j:n "kasvatusraja"). Saadaan x_j:n kontribuutio kohdeftioon = "kasvatusraja", z-rivin kerroin Valit. suurimman kontribuution antava x_j. Sen "kasvatusrajan"antava kerroin on *pivotti*. (Esim. -6)

3.**Vaihe** Pivotti-informaation käyttö

Ratkaistaan pivottia vastaava rajoiteyhtälö

$$x_1 = 2 - 6x_2 + x_3 \Rightarrow\ x_2 = \frac{1}{3} - \frac{1}{6}x_1 + \frac{1}{6}x_3$$

Sitten sijoitetaan tämä z-riviin

$$z = 2x_2 - 4x_3 = 2(\frac{1}{3} - \frac{1}{6}x_1 + \frac{1}{6}x_3) - 4x_3 = \frac{2}{3} - \frac{1}{3}x_1 - \frac{11}{3}x_3$$

ja muihin (kuin pivotointiin) vasemman puoleisten muuttujien riveihin: (tässä esim. vain x_4)

$$x_4 = 8 + 3(\frac{1}{3} - \frac{1}{6}x_1 + \frac{1}{6}x_3) - 4x_3 = 9 - \frac{1}{2}x_1 - \frac{7}{2}x_3$$

Saadaan uusi taulu

		x_1	x_3	
z	$\frac{2}{3}$	$-\frac{1}{3}$	$-\frac{11}{3}$	
x_2	$\frac{1}{3}$	$-\frac{1}{6}$	$\frac{1}{6}$	
x_4	9	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{7}{2}$	

4. **Vaihe.** Toisto. Toistetaan yo. menettely saatuun tauluun ja yritetään kasvattaa kohdeftiota (toistetaan kunnes kaikki z-rivin alkiot < 0, joka osoittaa ettei enää voida kasvattaa). Esim. tapuksessa näin on jo asianlaita ja vastaus on: Kohdeftion z maksimi on $\frac{2}{3}$, jonka tuottavat $x_1 = x_3 = 0$, $x_2 = 1/3$, $x_4 = 9$.

Huom. Tapaus, missä vakiosarakkeen alkio $= 0 \Leftrightarrow \ x \equiv 0$ käypä vektori) voi vaatia erikoiskäsittelyn (esim. vas. ja oik. puolen muuttujien vaihto)

Kertaus päättyy tähän.

Simpleksialgoritmi yleisessä tapauksessa

Tavoite: Yleisen LO-ongelman (1)-(5) palautus rajoitettuun normaalimuotoon.

Esim. Maksimoi (6) $z = x_1 + x_2 + 3x_3 - \frac{1}{2}x_4$, kun $x_i \geq 0$ ja

$$(7) \qquad \begin{cases} x_1 + 2x_3 \leq 740 \\ 2x_2 - 7x_4 \leq 0 \\ x_2 - x_3 + 2x_4 \geq \frac{1}{2} \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 9 \end{cases}$$

Ensin halutaan päästä eroon tyyppiä (3)& (4) olevista rajoituksista (yo. esim.:ssä (7):n kolme ensimmäistä rajoitusta). Tämä toteutetaan ottamalla käyttöön uusia muuttujia. y_i ns. *välysmuuttujia*,

jotka toteuttavat $y_i \geq 0$ ja jotka poistavat epäyhtälössä olevan "väljyyden"ja muuntavat ey:t yhtälöiksi (slack variable). Näitä on $m_1 + m_2$ kpl ja laskujen aikana niitä käsitellään kuten muita muuttujia; lopuksi ne kuitenkin jätetään huomiotta. Näin yo. esim. tulee muotoon

$$(8) \qquad \begin{cases} x_1 + 2x_3 + y_1 = 740 \\ 2x_2 - 7x_4 + y_2 = 0 \\ x_2 - x_3 + 2x_4 - y_3 = \frac{1}{2} \\ x_1 + x_2 + x_3 + x_4 = 9 \end{cases}$$

Toiseksi halutaan muuttaa em. tavalla muokattu ongelma rajoitettuun normaalimuotoon. Tätä varten tarvitaan kaksi seikkaa vrt. määritelmä (1) kerroin > 0, (2) $N \geq M$. Molemmat seikat saadaan voimaan ottamalla käyttöön *keinomuuttujat* z_i (artificial variable). Nyt (8) saa muodon

$$(9) \qquad \begin{cases} z_1 = 740 - x_1 - 2x_3 - y_1 \\ z_2 = -2x_2 + 7x_4 - y_2 \\ z_3 = \frac{1}{2} - x_2 + x_3 - 2x_4 + y_3 \\ z_4 = 9 - x_1 - x_2 - x_3 - x_4 \end{cases}$$

Esim. on nyt rajoitetussa normaalimuodossa. Tämä $\Leftrightarrow$ alkup. kun $z_i = 0$ kaikilla i. Vielä 2 askelta:

1.**Askel** Korvataan kohdeftio (yo. esim.(6)) apukohdeftiolla

(10)
$$z' = -z_1 - z_2 - z_3 - z_4 = -(749\frac{1}{2} - 2x_1 - 4x_2 - 2x_3 + 4x_4 - y_1 - y_2 + y_3)$$

Suoritetaan simpleksialgoritmi kohdeftioon (10) rajoituksin (9). Kohdeftio maksimoituu ei-negatiivisilla z_i:n arvoilla jos $z_i = 0$. Odotamme, että simpleksialgoritmi antaa x_i, y_i:n vas. puolen ja z_i:t oikeanpuol. muuttujiksi. Unohdetaan z_i:t, jolloin jää x_i, y_i:t sisältävä probleema rajoitetussa normaalimuodossa.

2.**Askel.** Ratk. 1. askeleen tuottama ongelma mutta nyt alkuper. kohdeftiolla.

		x_1	x_2	x_3	x_4	y_1	y_2	y_3	
z	0	1	1	3	$-\frac{1}{2}$	0	0	0	
z_1	740	-1	0	-2	0	-1	0	0	
z_2	0	0	-2	0	7	0	-1	0	
z_3	$\frac{1}{2}$	0	-1	1	-2	0	0	1	
z_4	9	-1	-1	-1	-1	0	0	0	
z'	$-749\frac{1}{2}$	2	4	2	-4	1	1	-1	

Yo. tauluun liittyvä LO-tehtävä on raj.norm. muodossa, joten se voidaan ratkaista edellä esitetyllä menettelyllä. Saadaan seuraava taulu kirjan algoritmin `NR::simplex` avulla.

		x_1	y_2	y_3	
z	17.03	$-.95$	$-.05$	-1.05	
x_2	3.33	$-.35$	$-.15$	.35	
x_3	4.73	$-.55$	.05	$-.45$	
x_4	.95	$-.10$	.10	.10	
y_1	730.55	.10	$-.10$	.90	

Algoritmin syötetietoina on tämän sivun ensimmäisen taulun paksunnetun viivoituksen sisään jäävä osa.

Algm `NR::simplx` s.439

Input: tehtävä taulumuodossa (paksunnettujen viivojen sisälle jäävä osa taulusta) matriisina A

Output: A uudelleen indeksoitava A:n $J+1$:llä rivillä on nyt muuttuja $x(IPOS)V(J))$, $J = 1, ..., M$

$POSV(J) > N \Rightarrow y$-muuttuja ts. $x_{N+J} = y_j$

A:n $J+1$:ssä sarakkeessa nyt muuttuja $x(IZROV(J))$, $J = 1, .., N$. Jos $IZROV(J) > N$ niin $x_{N+j} = y_j$ ja, jos $IZROV(J) > N+m_1+m_2$, niin ko. A:n $J+1$:s sarake pitää jättää vaille huomiota.

```
// FILE: mysimplx.cpp begins
#include <cstdio>
```

```
#include <cstdlib>
#include <string>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include "nr.h"
using namespace std;

// Driver for routine simplx

int main(void)
{
  const int N=4,M=4,NP=N+1,MP=M+2;
  const int M1=2,M2=1,M3=1;      // M1+M2+M3 = M
  const int NM1M2=N+M1+M2;
  int i,j,icase;
  DP c_d[MP*NP]=
  {0.0,1.0,1.0,3.0,-0.5,
   740.0,-1.0,0.0,-2.0,0.0,
   0.0,0.0,-2.0,0.0,7.0,
   0.5,0.0,-1.0,1.0,-2.0,
   9.0,-1.0,-1.0,-1.0,-1.0,
   0.0,0.0,0.0,0.0,0.0};
  string txt[NM1M2]=
  {"x0","x1","x2","x3","y0","y1","y2"};
  Vec_INT izrov(N),iposv(M);
  Mat_DP a(c_d,MP,NP);

  NR::simplx(a,M1,M2,M3,icase,izrov,iposv);
  if (icase == 1)
    cout << endl << "unbounded objective function" << endl;
  else if (icase == -1)
    cout << "no solutions satisfy constraints given" << endl;
  else {
    cout << endl << setw(11) << " ";
    for (i=0;i<N;i++)
      if (izrov[i] < NM1M2) cout<<"        "<<txt[izrov[i]];
    cout << endl << endl;
    cout << fixed << setprecision(3);
    for (i=0;i<=M;i++) {
      if (i == 0 || iposv[i-1] < NM1M2) {
        if (i > 0)
          cout << txt[iposv[i-1]];
        else
          cout << "  ";
        cout << setw(10) << a[i][0];
```

```
        for (j=1;j<=N;j++)
          if (izrov[j-1] < NM1M2)
            cout << setw(10) << a[i][j];
        cout << endl;
      }
    }
  }
  return 0;
}
// FILE: mysimplx.cpp ends
/* Output:
                    x0        y1        y2

          17     -0.95     -0.05     -1.05
y0       731       0.1      -0.1       0.9
x1      3.33     -0.35     -0.15      0.35
x3      0.95      -0.1       0.1       0.1
x2      4.72     -0.55      0.05     -0.45
*/
```

Esitämme seuraavaksi `mysimplx.cpp`:n muokatun version `mysix4.cpp`, joka on pyritty tekemään joustavammaksi käyttää. Komennolla

`./mysix4 <mysix4.inp >mysix4.out`

ohjelma ratkaisee saman tehtävän kuin `mysimplx.cpp`. Tiedosto `mysix4.inp` on seuraava:

```
4 2 1 1
1 1 3 -0.5
740 0 0.5 9
1 0 2 0
0 2 0 -7
0 1 -1 2
1 1 1 1
n
// FILE: mysix4.cpp begins
// g++ mysix4.cpp -L../lib -I../utils -I../democpp02 -o a -lm -lnr
// Usage: ./a < file.inp where file.inp is at the end of program
/* This program solves:
   Maximize  z = \sum_{p=1}^N a_{0p}x_p
   under
   x_p >= 0, p =1,...,N
   \sum_{p=1}^N a_{ip}x_p <= b_i, i =1,...,m_1
```

```
   \sum_{p=1}^N a_{jp}x_p >= b_j, j =m_1+1,...,m_1+m_2
   \sum_{p=1}^N a_{kp}x_p = b_k, k =m_1+m_2+1,...,m_1+m_2+m_3
   where all b_i >=0.
*/

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
#include "nr.h"
#include "matutl02.cpp"

using namespace std;

#define u1 10
#define u2 11
#define u3 12
#define gln u1
#define glm u1
#define glnp u2    // np >= n+1
#define glmp u3    // mp >= m+2
#define glnm1m2 u3

void writemat(Mat_DP &a, int p1, int p2)
{
  char c='y';
  int i,j;
  cout<<"Problem in tabular form is:"<<endl;
  cout<<setw(17)<<" ";
  for(i=1;i<=p1;i++) cout<<"         x"<<i;
  cout<<endl;
  for(i=1;i<=p1;i++) {
    if(i==1) cout<<"z     ";
    if(i>1) cout<<"z"<<i-1<<"    ";
    for(j=1;j<=p2;j++) {
      cout.precision(3);   // ***************
      cout << scientific << setw(11) <<a[i][j];
    }
    cout<<endl;
  }
  cout<<"Type y if you want to correct an element"<<endl;
```

```
  cin>>c;
  while(c=='y') {
    cout<<"Enter indices of the element"<<endl;
    cin>>i>>j;
    cout<<"Enter now the new element"<<endl;
    cin>>a[i][j];
    cout<<"Matrix A is:"<<endl;
    for(i=1;i<=p1;i++) {
      for(j=1;j<=p2;j++) {
        cout.precision(2);
        cout <<scientific <<a[i][j] << "  ";
      }
      cout<<endl;
    }
    cout<<"Type y if you want to correct an element"<<endl;
    cin>>c;
  }
}

void enterproblem(Mat_DP &a, int *n, int *m, int *np, int *mp,
                  int *nm1m2, int *m1, int *m2, int *m3)
{
  int i,j;
  cout<<"This program solves the LP-problem on p. 430 of NR."<<endl;
  cout<<"Please specify now the problem (n+m1+m2+m3<11):"<<endl;
  cout<<"Enter first integers n,m1,m2,m3 >=0:"<<endl;
  cin>>*n>>*m1>>*m2>>*m3;
  *m=*m1+ *m2+ *m3;
  *np=*n+1;  *mp= (*m)+2;
  *nm1m2=*n + *m1 + *m2;
  cout<<"Enter now the "<<*n<<" coefficients of the object";
  cout<<"function:"<<endl;
  cout<<"Constant term must be zero as on p. 430."<<endl;
  for(i=1;i<=*n;i++) cin >>a[1][i+1];
  a[1][1]=0;
  for(i=*n+2;i<=u2;i++) a[1][i]=0;
  cout<<"Enter now the "<<*m<<" non-negative coefficients  b[i]"<<endl;
  for(i=1;i<=*m;i++) cin>>a[i+1][1];
  for(i=*m+2;i<=u3;i++)                  a[i][1]=0.0;
  for(i=2;i<=(*m1+1);i++)                a[i][*n+2]=-1;
  for(i=*m1+2;i<=(*m1+*m2+2);i++)        a[i][*n+2]=1;
  for(i=*m1+*m2+3;i<= *m1+*m2+*m3+3;i++) a[i][*n+2]=0;
  if(*m1>0) {
    cout<<"Enter first coefficients in restrictions of the form <=:"<<endl;
    for(i=2;i<= *m1+1;i++) {
```

```
      for(j=2;j<= *n+1;j++) {
        cin>>a[i][j];
        a[i][j]=-a[i][j];
      }
    }
  }
  if(*m2>0) {
    cout<<"Enter next coefficients in restrictions of the form >=:"<<endl;
    for(i=*m1+2;i<= *m1+*m2+1;i++) {
      for(j=2;j<= *n+1;j++) {
        cin>>a[i][j];
        a[i][j]=-a[i][j];
      }
    }
  }
  if(*m3>0){
    cout<<"Enter finally coefficients in restrictions of the form =:"<<endl;
    for(i=*m1+*m2+2;i<= *m1+*m2+*m3+1;i++) {
      for(j=2;j<=(*n+1);j++) {
        cin>>a[i][j];
        a[i][j]=-a[i][j];
      }
    }
  }
}

int main()
{
  int i,icase,j,n,m,np,mp,nm1m2;
  Vec_INT izrov(gln);
  Vec_INT iposv(glm);
  Mat_DP aa(glmp+1,glnp+1);
  Vec_DP coefz(glnp);
  DP s=0.0;
  const char *ch2;
  int m1,m2,m3;              // m1+m2+m3=m
  enterproblem(aa,&n,&m,&np,&mp,&nm1m2,&m1,&m2,&m3);
  writemat(aa,m+1,n+1);
  Mat_DP a(m+2,n+1);
  for (i=0;i<m+2;i++)
    for (j=0;j<n+1;j++)
      a[i][j]=aa[i+1][j+1];
  for (i=0;i<gln;i++) coefz[i]=a[0][i];
  NR::simplx(a,m1,m2,m3,icase,izrov,iposv);
```

```
if (icase == 1)
  cout << endl << "unbounded objective function" << endl;
else if (icase == -1)
  cout << "no solutions satisfy constraints given" << endl;
else {
  cout << endl << setw(15) << " ";
  for (i=0;i<n;i++)
  {
    ch2=" x";
    if (izrov[i] < nm1m2) {
      if (izrov[i]<n)
        cout<<setw(8)<<ch2<<izrov[i]+1<<" ";
      else {
        ch2=" y";
        cout<<setw(8)<<ch2<<izrov[i]+1-n<<" ";
      }
    }
  }
  cout << endl;
  cout << fixed << setprecision(3);
  for (i=0;i<=m;i++)
  {
    if (i == 0 || iposv[i-1] < nm1m2) {
      ch2=" x";
      if (i > 0)
      {
        if (iposv[i-1]<n)
          cout<<ch2<<iposv[i-1]+1<<" ";
        else {
            ch2=" y";
            cout<<ch2<<iposv[i-1]+2-n<<" ";
        }
      }
      else
        cout << "    ";
      cout << setw(10) << a[i][0];
      for (j=1;j<=n;j++)
        if (izrov[j-1] < nm1m2)
          cout << setw(10) << a[i][j];
      cout << endl;
    }
  }
}

cout<<"\niposv:";
```

```
  for (i=0;i<glm;i++) cout<<setw(2)<<iposv[i];
  cout<<"\nizrov:";
  for (i=0;i<gln;i++) cout<<setw(2)<<izrov[i];
  s=0.0;
  cout<<"\nMax. value of object function:\n z= ";

  for (i=0;i<m;i++) {
    if ((iposv[i]>-1) &&(iposv[i]<n)) {
      if (i>0) cout<<"+";
      cout<<"("<<coefz[iposv[i]+1]<<")*("<<a[i+1][0]<<")";
      s += coefz[iposv[i]+1]*a[i+1][0];
    }
  }
  printf("\n  = %10.4lf\n",s);
  showmat2(a, " %8.4lf");
  return 0;
}
// FILE: mysix4.cpp ends.
// Example input file mysix4.inp:
// to solve problem (10.8.7) on p. 432 /NR
4 2 1 1
1 1 3 -0.5
740 0 0.5 9
1 0 2 0
0 2 0 -7
0 1 -1 2
1 1 1 1
n
```

Tulos kirjoitetaan tiedostoon `NR::mysix4.out` :

```
This program solves the LP-problem on p. 430 of NR.
Please specify now the problem (n+m1+m2+m3<11):
Enter first integers n,m1,m2,m3 >=0:
Enter now the 4 coefficients of the objectfunction:
Constant term must be zero as on p. 430.
Enter now the 4 non-negative coefficients  b[i]
Enter first coefficients in restrictions of the form <=:
Enter next coefficients in restrictions of the form >=:
Enter finally coefficients in restrictions of the form =:
Problem in tabular form is:
                         x1         x2         x3         x4         x5
z              0          1          1          3       -0.5
z1           740         -1         -0         -2         -0
z2             0         -0         -2         -0          7
z3           0.5         -0         -1          1         -2
```

```
z4              9         -1         -1         -1         -1
Type y if you want to correct an element

                       x1        y2        y3
            17     -0.95     -0.05     -1.05
 y2        731       0.1      -0.1       0.9
 x2       3.33     -0.35     -0.15      0.35
 x4       0.95      -0.1       0.1       0.1
 x3       4.72     -0.55      0.05     -0.45

iposv: 4 1 3 2 0 0 0 0 0 0
izrov: 0 5 7 6 0 0 0 0 0 0
Max. value of object function:
 z= +(1)*(3.33)+(-0.5)*(0.95)+(3)*(4.72)
  =    17.0250

6x5 matrix:
  17.0250  -0.9500  -0.0500  -1.9500  -1.0500
 730.5500   0.1000  -0.1000   1.1000   0.9000
   3.3250  -0.3500  -0.1500  -0.3500   0.3500
   0.9500  -0.1000   0.1000  -0.1000   0.1000
   4.7250  -0.5500   0.0500  -0.5500  -0.4500
   0.0000   0.0000   0.0000  -1.0000   0.0000
```

10.9 Kombinatorinen minimointi

Kombinatorinen minimointi tarkastelee minimointia tilanteessa, jossa tapahtuma-avaruus on diskreetti. Tyypillisiä esimerkkejä ovat erilaiset verkkoihin liittyvät ongelmat. Ainoa tällainen ongelma, jota tässä luvussa tarkastellaan on kauppamatkustajan ongelma. Jatkuvan tapahtuma-avaruuden tilanteessa oli mielekästä puhua vähenemissuunnista, mutta diskreetissä tapauksessa ei tälle käsitteelle ole luontevaa geometrista tulkintaa. Muutenkin geometrisen mielikuvan muodostaminen kohdefunktiosta on hankalampaa.

Kauppamatkustajan ongelma. (Travelling salesman problem (TSP).) On etsittävä annetun n:nnän kaupungin kautta käyvä lyhin reitti.

Koska jonon $\{1, ..., n\}$ permutointeja on $n! \approx \sqrt{2\pi} n^{n+\frac{1}{2}} e^{-n}$ kappaletta ja permutoinnit voidaan samaistaa kulkureittien kanssa, saadaan tästä yläraja TSP:n vaativuudelle. Alarajan löytäminen

taitaa edelleenkin olla avoin ongelma. TSP on vaativuusluokkaa NP oleva ongelma, sille ei tunneta polynomista algoritmia.

TSP on erittäin tärkeä käytännössä. Esimerkiksi voidaan ajatella teollisuusrobotin toimintaa, joka iskee peltilevyyn tiettyihin kohtiin niitit. Työn tehokkuus riippuu suoraan TSP:n ratkaisusta. Samoin puhelinliikenteen reititys. Sovellusten vuoksi TSP on tullut keskeiseksi alan ongelmaksi. Etsittäessä tehokkaampia algoritmeja globaalin minimin löytämiseksi on menestyksellisesti kokeiltu fysiikasta peräisin olevia ideoita. Laskennallisessa fysiikassa on luotu matemaattisia malleja kappaleen jähmettymiselle, joita voidaan soveltaa TSP:hen.

Kuumien metallien jähmettymisessä ja kiteytymisessä lopputulos riippuu oleellisesti siinä mekanismista, jolla lämpötilaa lasketaan. Jos lämpötilaa lasketaan hitaasti molekyylit "löytävät oman paikkansa"ja muodostuu kiteitä (potentiaalienergian minimiä vastaava konfiguraatio). Jos taas lasketaan liian nopeasti, näin ei käy (karkaisu).

Normaalit minimointimenetelmät pyrkivät mahdollisimman nopeasti minimiin (nopea jäähtyminen) ja ne pysähtyvät tavallisesti lokaaliin minimiin. Yo. hitaan jäähtymisen (annealing) ideaa numeriikkaan on soveltanut Metropolis et al. (1953).

Kirjan algm `NR::anneal` s.448 ratkaisee kauppamatkustajan ongelman yo. termodynaamisen filosofian hengessä. Kirjamme nykyinen 2. laitos esittää myös miten annealing menetelmää voidaan soveltaa myös tilanteessa, jossa tapahtuma-avaruus on jatkuva. Toinen ohjelma osoittaa miten anneling-henkisesti voidaan muokata `NR::amoeba` algoritmia. Tehtävänä on minimoida funktio, joten tapahtuma-avaruus on ko. tapauksessa jatkuva.

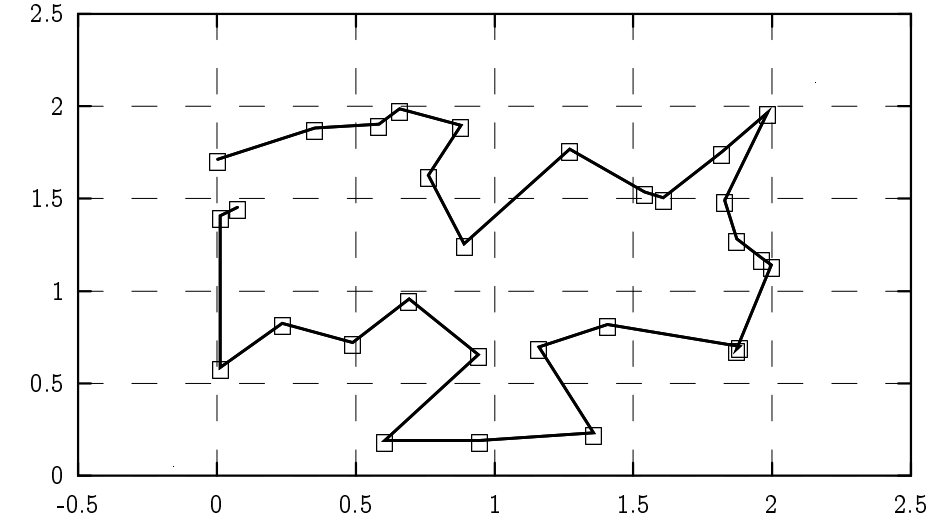
```
// FILE: myann2.cpp begins
//  g++ myann2.cpp -L../lib -I../utils -I../democpp02 -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr
// This program generates random city coordinates and finds
// for the Travelling Salesman Problem (TSP) the shortest route
// that passes through all of them. Method: anneal.
// This procedure is repeated several times and the histogram
```

```
// of route lengths is displayed.
#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
// #define PRINT 1
#include "plot.c"
using namespace std;
// Driver for routine anneal

void hist(Vec_DP x,  int nrbins, const char* mytitle)
{
  FILE *fp;
  Mat_DP xy(nrbins,2);
  int i,j, tiedostoon=0;
  double xmin=x[(1-1)], xmax=x[(1-1)],s=0.0, dx=0.0,count=0.0;
  for(i=(1-1);i<x.size();i++) {
    if(x[i]<xmin) xmin=x[i];
    if(x[i]>xmax) xmax=x[i];
    s+=x[i];
  }
  for(i=(1-1);i<(nrbins);i++) {
    // xy[i][0]=i*1.0;
    xy[i][0]=xmin+(i+0.5)*(xmax-xmin)/nrbins;
    xy[i][1]=0.0; }
  dx=xy[1][0]-xy[0][0];
  dx=(dx>0)? dx: 1.0;
  for(i=(1-1);i<x.size();i++)
    for(j=0;j<nrbins;j++)
      {
        if ((j<nrbins-1)&&
            ((x[i]-xmin)>=(((xmax-xmin)/(nrbins))*j*1.0)&&
             (x[i]-xmin)<(((xmax-xmin)/(nrbins))*(j+1.0)))) xy[j][1]+=1.0;
        else
          if ((j==nrbins-1)&&
              ((x[i]-xmin)>=(((xmax-xmin)/(nrbins))*j*1.0)&&
               (x[i]-xmin)<=(((xmax-xmin)/(nrbins))*(j+1.0)))) xy[j][1]+=1.0;
      }
  for(j=0;j<nrbins;j++) count = (count<xy[j][1])? xy[j][1]: count;
```

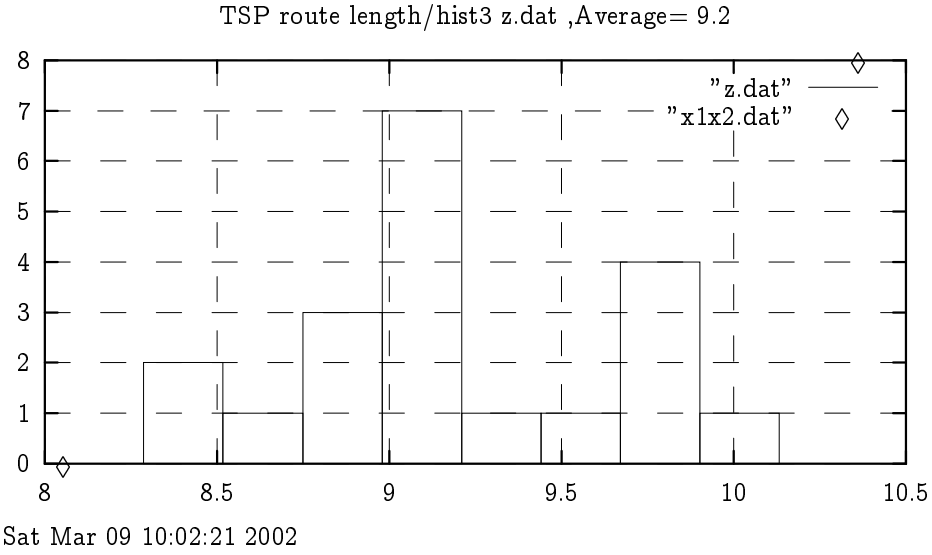
```
  fp = fopen("z.dat","w");
  for (i=(1-1);i<(nrbins);i++)
    fprintf(fp,"%lf   %lf\n",xy[i][(1-1)],xy[i][1]);
  fclose(fp);
  //  gnuplt2("z.dat","z.dat",5,NULL);
  fp = fopen("x1x2.dat","w");
  fprintf(fp,"%lf10.5  0.000 \n %lf10.5  %lf \n",xmin-1.0*dx,xmax+1.0*dx,
          (double)count+1.0); // Extreme corners of plotting area
  fclose(fp);
  fp=fopen("gnuplt.cmd","w");
  if (tiedostoon==1)
    {
      fprintf(fp,"set terminal postscript\n");
      fprintf(fp,"set output \"a.ps\"\n");}
  fprintf(fp,"set title \"%s/hist3 z.dat ,Average=%5.1f\"  \n",\
          mytitle,s/x.size());
  fprintf(fp,"set timestamp\n");
  fprintf(fp,"set grid\n");
  fprintf(fp,"plot \"%s\" w boxes lw 4, \"x1x2.dat\" w p\n","z.dat");
  fprintf(fp,"pause -1");
  fclose(fp);
  cout<<xy<<endl;
  cout<<x<<endl;
  system("gnuplot gnuplt.cmd");
}

int MyPlot(Vec_DP x0,Vec_DP y0, Vec_DP x1,Vec_DP y1,
           Vec_DP x2,Vec_DP y2)
/*
Plots three curves x0,y0, x1,y1,  x2, y2.
Here x0, y0 have equal length likewise for x1,y1 and x2,y2.
But the lengths of x0 and x1 need not be the same.
*/
{
  int n0=x0.size(), n1=x1.size(),n2=x2.size();
  const char *fname[10];
  fname[0]="z0.dat";
  fname[1]="z1.dat";
  fname[2]="z2.dat";
  for (int j=0;j<3;j++)
    {
      ofstream fp(fname[j]);
      if (fp.fail())
        {cout << "File  "<< fname[j]
              <<" could not be opened.\n"<<endl;
```

```
        abort();}
      if (j==0)  for (int i=0;i<n0;i++)
        fp<<x0[i]<<"  "<<y0[i]<<endl;
      if (j==1)  for (int i=0;i<n1;i++)
        fp<<x1[i]<<"  "<<y1[i]<<endl;
      if (j==2)  for (int i=0;i<n2;i++)
        fp<<x2[i]<<"  "<<y2[i]<<endl;
      fp.close();}
  plot(fname[0],"b-3",fname[1],"b-3",fname[2],"ks3",NULL);
  return 0;
}

double length(Vec_DP x,Vec_DP y, Vec_INT iorder)
  // This is the length of the closed polygonal line
  // with vertices at (x,y)
{
  DP s=pow(pow(x[iorder[0]] -x[iorder[x.size()-1]],2.0)+
           pow(y[iorder[0]] -y[iorder[x.size()-1]],2.0), 0.5);
  for (int i=0;i<x.size()-1;i++)
    s+=pow(pow(x[iorder[i]] -x[iorder[i+1]],2.0)+
           pow(y[iorder[i]] -y[iorder[i+1]],2.0),0.5);
  return s;
}

DP MinRoute(Vec_DP x, Vec_DP y, Vec_INT &iorder)
{
  cout<<"Initial length = "<<length(x,y,iorder)<<endl;
  // MyPlot(x,y,x,y,x,y);
  NR::anneal(x,y,iorder);
  cout << endl << "*** System Frozen ***" << endl;
  cout << "Final path:" << endl;
  cout << setw(5) << "city" << setw(8) << "x";
  cout << setw(11) << "y" << endl;
  cout << fixed << setprecision(4);
  Vec_DP xx(x), yy(y);
  for (int i=0;i<x.size();i++)
    {
      int ii=iorder[i];
      xx[i]=x[ii]; yy[i]=y[ii];
      cout << setw(4) << ii << setw(11) << x[ii];
      cout << setw(11) << y[ii] << endl;
    }
  DP t= length(x,y,iorder);
  cout<<"****Final length = "<<t<<endl;
  MyPlot(xx,yy,xx,yy,xx,yy);
```

```
  return t;
}
int main(int argc, char* argv[])
{
  if (argc<3) {cout<<"Usage: ./myann2 30  15"<<endl; abort();}
  const int NCITY=atoi(argv[1]), PMAX=atoi(argv[2]);
  init_srand();
  Vec_INT iorder(NCITY);
  Vec_DP x(NCITY),y(NCITY),len(PMAX);
  for (int p=0;p<PMAX;p++)
    {
      for (int i=0;i<NCITY;i++)
        {
          x[i]= rdm(0.0,2.0);
          y[i]=rdm(0.0,2.0);
          iorder[i]=i;
          cout << setw(4) << i << setw(11) << x[i];
          cout << setw(11) << y[i] << endl;
        }
      len[p]=MinRoute(x,y,iorder);
    }
  cout<< len<<endl;
  hist(len,8,"TSP route length");
  return 0;
}
// FILE: myann2.cpp ends
```



Sat Mar 09 10:02:19 2002



Yo. kuvat on tuotettu komentoriviargumentein 30 20 ohjelmalla myann2.cpp.

```
// FILE: myamebsa.cpp begins
// Driver for routine amebsa
// g++ myamebsa.cpp -I../utils -I../democpp02 -L../lib -o a -lm -lnr

#include <cstdio>
#include <cstdlib>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>
using namespace std;

#include "nr.h"

int idum=(-64);

DP tfunk(Vec_I_DP &p)
{
  const int N=4;
  const DP RAD=0.3,AUG=2.0;
  const DP wid_d[N]={1.0,3.0,10.0,30.0};
  int j;
  DP q,r,sumd=0.0,sumr=0.0;
  Vec_DP wid(wid_d,N);
```

```
  for (j=0;j<N;j++)
  {
    q=p[j]*wid[j];
    r=DP(q >= 0 ? int(q+0.5) : -int(0.5-q));
    sumr += q*q;
    sumd += (q-r)*(q-r);
  }
  return 1+sumr*(1+(sumd > RAD*RAD ? AUG : AUG*sumd/(RAD*RAD)));
}

int main(void)
{
  const int NP=4, MP=5;
  const DP FTOL=1.0e-6;
  const DP xoff[NP]={10.0,10.0,10.0,10.0};
  int i,iiter,iter,j,jiter,nit;
  DP temptr,yb,ybb;
  Vec_DP x(NP),y(MP),pb(NP);
  Mat_DP p(MP,NP);
  for (i=0;i<MP;i++)
    for (j=0;j<NP;j++) p[i][j]=0.0;
      cout << fixed << setprecision(6);
  for (;;)
  {
    for (j=1;j<MP;j++) p[j][j-1]=1.0;
      for (i=0;i<MP;i++)
      {
        for (j=0;j<NP;j++) x[j]=(p[i][j] += xoff[j]);
        y[i]=tfunk(x);
      }
    yb=1.0e30;
    cout << "Input t, iiter (t=0 to end):" << endl;
    cin >> temptr >> iiter;
    if (temptr <= 0.0) break;
    ybb=1.0e30;
    nit=0;
    for (jiter=0;jiter<100;jiter++)
    {
      iter=iiter;
      temptr *= 0.8;
      NR::amebsa(p,y,pb,yb,FTOL,tfunk,iter,temptr);
      nit += iiter-iter;
      if (yb < ybb)
      {
        ybb=yb;
```

```
        cout << setw(6) << nit << setw(14) << temptr;
        for (j=0;j<NP;j++) cout << setw(10) << pb[j];
        cout << setw(15) << yb << endl;
      }
      if (iter > 0) break;
    }
    cout << endl << "Vertices of final 3-D simplex and";
    cout << " function values at the vertices:" << endl;
    cout << setw(3) << "i" << setw(10) << "w[i]" << setw(12) << "x[i]";
    cout << setw(12) << "y[i]" << setw(12) << "z[i]";
    cout << setw(14) << "function" << endl << endl;
    for (i=0;i<MP;i++)
    {
      cout << setw(3) << i;
      for (j=0;j<NP;j++) cout << setw(12) << p[i][j];
      cout << setw(15) << y[i] << endl;
    }
    cout << setw(3) << 99;
    for (j=0;j<NP;j++) cout << setw(12) << pb[j];
    cout << setw(15) << yb << endl << endl;
  }
  cout << "Normal completion" << endl;
  return 0;
}
// FILE: myamebsa.cpp ends

/*

Input t, iiter (t=0 to end):
1e5
100
   101         80000    2.9378   13.9933   10.1153  -1.83195        24821.9
   202         64000   8.41456  -10.9117   7.32063  0.635657        20596.6
.........

Vertices of final 3-D simplex and function values at the vertices:
  i      w[i]        x[i]        y[i]        z[i]      function

  0 -0.00285134 0.000400207-0.000144002 -8.0757e-05        1.00002
  1  0.00126823 0.000377812-0.000397716 6.58558e-06        1.00002
  2-0.000657412 0.000688685 1.22072e-05 4.21202e-05        1.00001
  3  0.00202642  0.00046798 0.000108441-3.94758e-05        1.00001
  4 0.000182318  0.00144037-0.000298595 3.91761e-05        1.00003
 99 2.59937e-05 0.000326425-6.89748e-05 7.43448e-06             1
```

*/

Lisää annealing-menetelmästä: P.J.M. von Laarhoven and E.H.L. Aarts: Simulated annealing: Theory and applications. Kluver Acad.Publ.1987.

Conjugate gradient algorithm	
$\mathbf{x_0}$= initial guess	
$\mathbf{g_0} = \nabla f(\mathbf{x_0})$	
$\mathbf{s_0} = -\mathbf{g_0}$	
for $k = 0, 1, 2, ...$	
Choose α_k to minimize $f(\mathbf{x_k}+\alpha_k\mathbf{s_k})$	{perform line search }
$\mathbf{x_{k+1}} = \mathbf{x_k} + \alpha_k\mathbf{s_k}$	{update solution }
$\mathbf{g_{k+1}} = \nabla f(\mathbf{x_{k+1}})$	{ compute new gradient }
$\beta_{k+1} = (\mathbf{g_{k+1}^T g_{k+1}})/(\mathbf{g_k^T g_k})$	
$\mathbf{s_{k+1}} = -\mathbf{g_{k+1}} + \beta_{k+1}\mathbf{s_k}$	{ modify gradient }
end	

The formula for β_{k+1} in this algorithm is due to Fletcher and Reeves. An alternative formula due to Polak and Ribiere suggests the choice

$$\beta_{k+1} = ((\mathbf{g_{k+1}} - \mathbf{g_k})^\mathbf{T}\mathbf{g_{k+1}})/(\mathbf{g_k^T g_k}),$$

which sometimes is better.

Algm on toteutettu esimerkkiohjelmassa `mycgrad2.cpp`.

11 OMINAISARVOT

$N \times N$ matriisilla A on *ominaisvektori* x ja vastaava *ominaisarvo* λ jos

$$(1) \qquad Ax = \lambda x \text{ ja } x \neq 0.$$

$$(1) \Rightarrow (2) \qquad \det |A - \lambda I| = 0.$$

Astetta n olevan polynomiyhtälön (2) juuret antavat ominaisarvot. Ko. polynomia kutsutaan *karakteristiseksi polynomiksi.* Kaikkien ominaisarvojen joukkoa kutsutaan matriisin *spektriksi.*

Periaatteessa omininaisarvot voidaan aina laskea ratkaisemalla (2). Tässä luvussa esitellään useita huomattavasti tehokkaampia menetelmiä omininaisarvojen laskuun.

Ominaisarvon määritelmästä (1) seuraa heti, että jos x on matriisin A ominaisarvoon λ liittyvä ominaisvektori ja $\tau \in R$, niin silloin x on myös matriisin $A_\tau \equiv A + \tau I$ ominaisarvoon $\lambda + \tau$ liittyvä ominaisvektori. Kuten myöhemmin tulemme näkemään, tällä ominaisarvojen siirtotempulla on tärkeä merkitys osana ominaisarvojen numeerista laskentaa.

Nimityksiä:

A *symmetrinen* $\Leftrightarrow A = A^\top \Leftrightarrow a_{ij} = a_{ji}\ \forall i, j$

A *hermiittinen l. itseadjungoitu* $\Leftrightarrow A = A^\dagger \Leftrightarrow a_{ij} = a^*_{ji}$ (a^*_{ji} on a_{ji}:n kompleksikonjugaatti)

A *ortogonaalinen* $\Leftrightarrow A \cdot A^\top = A^\top A = 1 \Leftrightarrow A^\top = A^{-1}$

A *unitaarinen* $\Leftrightarrow A^\dagger = A^{-1}$

A *normaali* $\Leftrightarrow AA^\dagger = A^\dagger A$

Huom. Diagonaalisen matriisin diagonaalialkiot ovat ominaisarvoja.

Perusidea. Ominaisarvojen laskemiseksi A yritetään muuntaa, ominaisarvot säilyttäen, diagonaalimuotoon.

$$A \to P_1^{-1} A P_1 \to P_2^{-1} \cdot P_1^{-1} \cdot A \cdot P_1 \cdot P_2$$

Tällöin

$$\det|A-\lambda I| = \det|P_1^{-1}AP_1 - \lambda I| = \det|P_1^{-1}(A-\lambda I)P_1| =$$

$$\det|P_1^{-1}|\det|A-\lambda I|\det|P_1| = \det|A-\lambda I|,$$

joten yo. muunnokset säilyttävät ominaisarvot.

Yo. perusidea voidaan toteuttaa kahdella eri tavalla

1) alkeismuunnosten (Jacobi, Householder) iterointi

2) faktorisointi $A = F_L F_R$+iterointi (QR-hajotelma)

Yleispiirteitä.

- Jos halutaan vain ominaisarvot tai vain ominaisvektorit, mutta ei molempia, on tehtävä helpompi.

- Erityistä tyyppiä (reaalinen, symmetrinen) oleville matriiseille löytyy tehokkaampia algoritmeja.

Kirjallisuutta: Ks. lista Golub-van Laan (3. painos v.1989)

Coleman-van Laan

R.T. Gregory - D.L. Karney (1969), A collection of matrices for testing computational algorithms (J.Wiley)

Internetissä on Matrix Market, joka sisältää ehkäpä satoja esimerkkimatriiseja.

G. Strang: Linear algebra and its applications (v.1989)

11.1 Jacobin muunnokset symmetriselle matriisille

Jacobin kierto on matriisi

$$P_{pq} = \begin{bmatrix} 1 & & & & 0 \\ & \ddots & & & \\ & c & \dots & s & \\ & \vdots & 1 & \vdots & \\ & -s & \dots & c & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & 1 \end{bmatrix}$$

Diagonaalialkiot $= 1$ paitsi riveillä p ja q on alkiona c.

Diagonaalin ulkopuolella alkiot $= 0$ paitsi (ks. kaavio) s ja $-s$.

c ja s ovat kiertokulman ϕ sini ja kosini, joten $c^2 + s^2 = 1$.

Idea: Muodostet. $A' = P_{pq}^\top A P_{pq}$. lasket. A'_{pq} ja valit. ϕ s.e. $A'_{pq} = 0$ (ks.NR s.464)

Toistetaan tämä eri indeksille, kunnes A on konetarkkuuden puitteissa diagonaalinen. (Huom. Kerran jo nollattu alkio voi tulla uudelleen erisuureksi kuin 0!)

Algm `NR::jacobi` s.467

11.2 Givensin ja Householderin reduktiot

Givens

• Tehdään Jacobin kierrot diagonaalin alapuolisiin sarakkeen alkioihin edeten sarakkeittain vasemmalta oikealle, alkioittain ylhäältä alas,

• Yhteensä noin $n^2/2$ kiertoa

Householder

• Peruselementtinä $\mathcal{H}$:n muunnos: Olkoot $x, y \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, $|x| = |y|$. Silloin on olemassa $(n-1)$-ulotteinen taso T, $0 \in T$ s.e. $Px = y$, missä P on peilaus T.ssä. Selvästi $Pz = z$ kun $z \in T$. (P on ortogonaalinen lineaarikuvaus)

• $\mathcal{H}$:n algoritmi redusoi symmetrisen $N \times N$ matriisin A tridiag. muotoon $(N-2)$:lla ortogonaalisella muunnoksella seuraavaan tapaan:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1N} \\ a_{21} & \dots & a_{2N} \\ \vdots & \vdots & \\ a_{N1} & \dots & a_{NN} \end{bmatrix}$$

Sovelletaan em. muunnosta tälle x:lle kun $y = \begin{bmatrix} k \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$, $|k| = \left(\sum_{j=2}^N a_{j1}^2\right)^{1/2}$.

Olkoon P_1 pariin x, y liittyvä em. muunnos. Silloin

$$P_1 A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & {}^{(n-1)}P_1 & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1N} \\ \vdots & \vdots & \\ a_{N1} & \dots & a_{NN} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1N} \\ k & \dots & \\ \vdots & \dots & \\ 0 & \dots & \end{bmatrix}$$

$$A^1 = P_1 A P_1^\top = \begin{bmatrix} a_{11} & k & 0 & \dots & 0 \\ k & \dots & & & \\ 0 & \dots & & & \\ \vdots & \dots & & & \\ 0 & \dots & & & \end{bmatrix}$$

Seuraavassa vaiheessa valitaan edelliseen lauseen x:ksi A:n 2. sarakkeen $n-2$ alinta alkiota ja $y = \begin{bmatrix} h \\ 0 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}$ $(n-3)kpl$, $|h|^2 = \sum_{j=3}^{N} a_{j2}^2$.

Tällöin P_2:lla on muoto

$$P_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & \dots & & \\ \vdots & & \dots & & \\ 0 & 0 & \dots & & \end{bmatrix}$$

Saadaan $A^{(2)} = P_2 P_1 A P_1^\top P_2^\top$. Jatketaan kunnes kaikki sarakkeet on käsitelty yo. tavalla. Prosessi tuottaa A:sta toisen matriisin B, jolla samat ominaisarvot kuin A:lla ja joka on tridiagonaalisessa muodossa.

Algm `NR::tred2` s.474

11.3 Tridiagonaalimatriisin ominaisarvot ja -vektorit

Karakterisen polynomin juuret löydetään esim. Newtonin menetelmällä.

QR- ja QL-algoritmit

Reaalinen matriisi A voidaan esittää muodossa $A = QR$ missä Q on ortogonaalinen ja R yläkolmiomatriisi. Q löydetään esim. peräkkäisillä Householderin muunnoksilla. Vaihtoehtoisesti voidaan kirjoittaa $A = QL$ missä Q on ortogonaalinen ja L alakolmiomatriisi.

Nimitys: $QR-$, QL-esitys.

QL-algoritmi koostuu jonosta ortogonaalimuunnoksia: $A_s = Q_s L_s$, $A_{s+1} = L_s Q_s$ $(= Q_s^\top A_s Q_s)$.

Lause. 1) Jos A:lla on ominaisarvot λ_i s.e. $|\lambda_i| \neq |\lambda_j|$ kaikilla $i \neq j$ niin $A_s \to$ alakolmio kun $s \to \infty$. ominaisarvot diagonaalilla.

2) Jos A:lla on p kpl ominaisarvoja λ_i, joiden itseisarvot samoja, niin $A_s \to$ alakolmio kun $s \to \infty$ paitsi diagon. olevaa $p \times p$ blokkia, jonka ominaisarvot $\to \lambda_i$.

Todistus sivuutetaan. Ks. [BS] Sivutuote todistuksesta on että $a_{ij}^{(s)} \backsim (\frac{\lambda_i}{\lambda_j})^s$, huomaa $j > i \Rightarrow \frac{|\lambda_i|}{|\lambda_j|} \leq 1$. Konvergenssi kohti 0:aa voi olla hidasta, jos $\lambda_i \backsim \lambda_j$.

Konvergenssia voidaan kiihdyttää siirtotekniikalla: Jos A:n ominaisarvot ovat λ_i, niin $A - kI$:n ominaisarvot ovat $\lambda_i - k$. Kirjoittamalla

$$A_s - k_s I = Q_s L_s \Leftarrow A_{s+1} = L_s Q_s + k_s I = Q_s^T A_s Q_s$$

huomataan, että suppenemisvauhdin määräävä ominaisarvojen suhde on nyt

$$\frac{\lambda_i - k_s}{\lambda_j - k_s}.$$

Toimintastrategiana on valita k_s kullakin s siten että suppenemisvauhti on maksimaalinen.

Vielä tehokkaampi on ns. implisiittinen siirto, jota NR suosittaa.

Algm `NR::tqli` s. 480 toteuttaa reaalisen *symmetrisen* tridiagonaalimatriisin QL-hajoitelman implisittisin siirroin. Se soveltuu myös `NR::tred2`:n tuottaman symmetrisen (ehkä ei tridiagonaalisen) matriisin ominaisarvojen laskuun.

11.5 Yleisen matriisin reduktio Hessenbergin muotoon

Reaalisen symmetrisen matriisin ominaisarvot löydetään algm:n `NR::tqli` ja edeltävän `NR::tred2`:n avulla varsin tehokkaasti. Epäsymmetrisen matriisin tapaus on osoittautunut vaikeammaksi. NR:n resepti epäsymm. tapaukseen on kolmivaiheinen a) tasapainotus (balancing) b) reduktio Hessenbergin muotoon ts. ($a_{ij} = 0 \; \forall i \geq j + 2$) c) QR-algoritmi.

a) **Tasapainotus**: Muokataan (pyöristysvirheiden vaikutuksen pienentämiseksi) reaalinen matriisi A ortogonaalisilla muunnoksilla Q muotoon $Q \cdot A \cdot Q^{\top}$ s.e. ominaisarvot säilyvät mutta tasapainotetaan rivi-ja sarakesummia niin, että ne tulevat likimain samoiksi. Algm `NR::balanc` s. 483.

b) Reduktio Hessenbergin muotoon: Toteutetaan Gaussin eliminoinnin kaltaisellä menetelmällä. Algm `NR::elmhes` s.485.

c) **QR-algoritmi**. Vaiheiden a) & (b) jälkeen jatkokäsittelynä on QR-menetelmä. Algm `NR::hqr` s.491.

```
/* FILE: mych11.cpp begins */
/* gcc mych11.cpp -L../lib -I../util -o a -lm -lnr     */
/*  g++ -Wall beg.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr  */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
using namespace std;
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#define N 5
int main()
{
  int i, j;
  Mat_DP rand_mat(N,N), temp_mat(N,N), prod_mat(N,N), diff_mat(N,N);
  Vec_DP d(N), e(N);
  init_srand();
  /* Create random symmetric matrix */
  ranmat2(rand_mat,-10.0, 10.0);
  transp(rand_mat,temp_mat);
```

```
  prod_mat=temp_mat+rand_mat;
  rand_mat=prod_mat;  // Now symmetric
  temp_mat=rand_mat;
  /* Householder reduction */
  NR::tred2(temp_mat,  d, e);
  /* QL algorithm with implicit shifts */
  NR::tqli(d, e, temp_mat);
  printf("\n\n\nSymmetric random matrix:\n");
  showmat2(rand_mat, " %10.6lf");
  printf("\n\nEigenvalues:\n\n ");
  for (i = 0; i <= N-1; i++)
    printf("%-12.5lf ",d[i]);
  matmul(rand_mat, temp_mat, prod_mat );
  for (i = 0; i <= N-1; i++)
     for (j = 0; j <= N-1; j++)
        temp_mat[j][i] *= d[i];
  for (i = 0; i <= N-1; i++)
    for (j = 0; j <= N-1; j++)
      diff_mat[i][j] = prod_mat[i][j] - temp_mat[i][j];
  printf("\nnorm(A*x-lambda*x) = %12.4e\n",mnormp(diff_mat,2.0));
  printf("\n\nThe matrix A*x-lambda*x (should be 0):\n");
  showmat2(diff_mat, " %12.4e");
  return 0;
}

/* FILE: mych11.cpp ends */
/*
Symmetric random matrix:
5x5 matrix:
   1.237173   1.691847 -11.165518  -7.440216   9.466231
   1.691847 -18.371782  12.643289  10.716048  -0.357420
 -11.165518  12.643289 -14.454560   6.337935  -0.327107
  -7.440216  10.716048   6.337935  16.455957  -1.977455
   9.466231  -0.357420  -0.327107  -1.977455   5.702360
Eigenvalues:
 -3.49092     -11.15502    10.15300     -32.32196    27.38405
norm(A*x-lambda*x) =   2.7593e-14
The matrix A*x-lambda*x (should be 0):
5x5 matrix:
   4.4409e-16  -8.8818e-16  -8.8818e-16   7.1054e-15   1.7764e-15
   4.3854e-15   1.7764e-15   2.8866e-15  -1.0658e-14  -2.6645e-15
   2.4425e-15   0.0000e+00  -5.1001e-16  -1.0658e-14   0.0000e+00
   7.3275e-15   3.5527e-15   6.2172e-15  -1.3323e-14  -7.1054e-15
  -3.5527e-15  -3.5527e-15   3.5527e-15   7.9936e-15   0.0000e+00
*/
```

Seuraava demo-ohjelma antaa lisää esimerkkejä ominaisarvojen laskemisesta.

```
/* FILE myeigen2.cpp begins */
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include "nr.h"

#include "matutl02.h"
using namespace std;

void seigen(const Mat_DP &a, Mat_DP &eigvec, Vec_DP &eigval)
// a must be symmetric real square matrix
// column j of the matrix eigvec is the jth eigenvector
{
  int NP=a.nrows(), nrot;
  Vec_DP d(NP);
  Mat_DP v(NP,NP), e(NP,NP);
  /* Check that a is symmetric */
  DP s=0.0;
  for (int i=0; i<NP;i++)
    for (int j=0; j<i-1;j++) s+=abs(a[i][j]-a[j][i]);
  if ((s>1.0e-15)||(a.ncols()!=NP))
    {cout<<"Argument error in seigen"<<endl; abort();}
  e=a;
  NR::jacobi(e,d,v,nrot);
  NR::eigsrt(d,v);
  eigval=d;
  eigvec=v;
}

void eigen(Mat_DP &a, Vec_CPLX_DP &w)
{
  NR::balanc(a);
  NR::elmhes(a);
  NR::hqr(a,w);
}
int main()
{
  const int NP=5;
  Mat_DP e(NP,NP), eT(NP,NP), eigvec(NP,NP);
  Vec_CPLX_DP wri(NP);
  Vec_DP eigval(NP);
```

```
  init_srand();
  ranmat2(e, -2.0,2.0);
  eigen(e,wri);
  cout << "eigenvalues:" << endl;
  cout << setw(11) << "real" << setw(12) << "imag."
       << setw(11) << " abs "<< endl;
  for (int i=0;i<wri.size();i++)
    cout << setw(25) << wri[i] << setw(12)
    <<abs(wri[i])<< endl;
  ranmat2(e, -2.0,2.0);
  transp(e,eT);
  e=e+eT;  // This is symmetric
  seigen(e, eigvec,eigval);
  cout<<"Symmetric matrix:\n "<<endl;
  showmat2(e, "% 11.6f");
  cout<<"Eigenvalues:\n"<<eigval<<endl;
  return 0;
}
/* FILE myeigen2.cpp ends */

eigenvalues:
       real       imag.       abs
     (0.0630519,-1.43255)     1.43394
      (0.0630519,1.43255)     1.43394
             (-2.65948,0)     2.65948
Symmetric matrix:
3x3 matrix:
   1.376873   0.710549  -2.418001
   0.710549   2.953847  -0.358019
  -2.418001  -0.358019   3.740742
Eigenvalues:
     5.4386207 2.8212785 -0.18843683
Eigenvector j is column j of:
   -0.52701874   -0.028247942     0.84938407
   -0.26696004     0.95435978    -0.13390202
    0.80683554     0.29732048     0.51050656
```

11.6 Hermiittinen matriisi

Em. algm konvertointi kompleksimatriiseille ei ole triviaalia. Tästä syystä on paikallaan todeta, että hermiittiselle $n \times n$ matriisille $A = A_r + iA_i$, missä A_r, A_i , ovat $n \times n$ reaalimatriiseja, ominaisarvojen lasku voidaan palauttaa $2n \times 2n$ reaalimatriisin $B = [A_r - A_i; A_i A_r]$

ominaisarvojen laskuun. Jos B:llä on ominaisvektori z niin merk. $z = (q_r, q_i)$ missä sekä q_r että q_i ovat n-komponettisia reaalivektoreita. Silloin myös $z = (q_i, q_r)$ on samaan ominaisarvoon liittyä B:n ominaisvektori ja $z = q_r + i * q_i$ on samaan ominaisarvoon liittyä A:n ominaisvektori. Huomaa, että B on symmetrinen, joten sen ominaisarvot ovat reaalisia. Jos $\lambda_1, ..., \lambda_n$ ovat A:n ominaisarvot, niin B:n ominaisarvot ovat $\lambda_1, \lambda_1, ..., \lambda_n, \lambda_n$.

12 FOURIER-MUUNNOS

12.0. Johdanto

-Fourier-menetelmät soveltuvat datan käsittelyyn ja analyysiin (suuret datamäärät) esim. signaalianalyysissä ja sähkötekniikassa

-nopealla Fourier-muunnoksella on lukuisia sovelluksia esim. osittaisdiff. yhtälöiden numeriikkaan

Aloitamme lyhyellä Fourier-muunnosten ominaisuuksien luettelolla (jatkuva tapaus, tässä luvussa jatkossa lähinnä diskreetti tapaus).

$$H(f) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t) e^{2\pi i f t} dt \quad t = "\text{time}"$$

$$h(t) = \int_{-\infty}^{\infty} H(f) e^{-2\pi i f t} df \quad f = "\text{frekvenssi}" \tag{1}$$

Merkintä: $h(t) \Leftrightarrow H(f)$ (Muunnosparit)

Jos...	niin...
$h(t)$ reaal.	$H(-f) = H(f)^* \leftarrow$
$h(t)$ imag.	$H(-f) = -H(f)^*$
$h(t)$ parillinen $(h(t) = h(-t)$	$H(-f) = H(f)$
$h(t)$ pariton $(h(t) = -h(-t))$	$H(-f) = -H(f)$
$h(t)$ reaalinen ja parillinen	$H(f)$ reaal. ja parillinen
$h(t)$ $-$ $-''-$ $-$	$H(f)$ imag. ja pariton
$h(t)$ imag. ja parillinen	$H(f)$ imag. ja parillinen
$h(t)$ imag. ja pariton	$H(f)$ reaal. ja pariton

$$h(at) \Leftrightarrow \frac{1}{|a|} H(\frac{f}{a})$$

$$\frac{1}{|b|} h(\frac{t}{b}) \Leftrightarrow H(bf)$$

$$h(t-t_0) \Leftrightarrow H(f)e^{2\pi i f t_0}$$

$$(g*h)(t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau)h(t-\tau)d\tau$$

$(g*h)(t)$ on g:n ja h:n konvoluutio, $g*h = h*g$. Tavallisesti h, g reaalisia.

Konvoluutiolause: $g*h \Leftrightarrow G(f)H(f)$.

$Corr(g,h) = \int_{-\infty}^{\infty} g(\tau+t)h(\tau)d\tau$ (g:n ja h:n korrelaatio)

Korrelaatiolause: $Corr(g,h) \Leftrightarrow G(f)H^*(f)$.

Wiener-Khinchinin lause: $Corr(g,g) \Leftrightarrow |G(f)|^2$.

Parsevalin lause: $\int_{-\infty}^{\infty} |H(f)|^2 df = \int_{-\infty}^{\infty} |h(t)|^2 dt$.

Historiallisia huomautuksia: J. Fourier esitti v.1807 (21-vuotiaana), että mieliv. jatkuva ftio voidaan esittää sinien ja kosinien summana. Hänen ajatuksensa herättivät vastustusta mm. koska todistukset puuttuivat. F. sovelsi ideoitaan mm. lämmönjohtodiff. yhtälön ratkaisuun kellarien rakentamisessa.

12.1 Diskreetti Fourier-muunnos

Funktion h arvoja on mitattu tasavälein $h_n = h(n\Delta)$, $\Delta > 0$, $n = 0, 1, 2, ..., N-1$ (N parillinen). Oletetaan, että $h(t) = 0$ välin $(0, \Delta(N-1))$ ulkopuolella. Halutaan löytää approksimaatio $H(f_n)$:lle, $f_n = \frac{n}{N\Delta}$, $n = -\frac{N}{2}, ..., \frac{N}{2}$. Sijoitus 12.0 (1):een antaa

(1)
$$H(f_n) = \int_{-\infty}^{\infty} h(t)e^{2\pi i f_n t}dt \approx \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i f_n t_k}\Delta = \Delta \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n/N}.$$

$\sum_0^{N-1}$ on nimeltään pisteiden h_k, $n = 0, 1, 2, ..., N-1$, *diskreetti Fourier-muunnos*, ts.

(2)
$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} h_k e^{2\pi i k n/N}.$$

Diskreetille Fourier-muunnokselle pätevät monet jatkuvan Fourier-muunnoksen ominaisuudet kuten NR:n demo-ohjelmista ilmenee. Käänteismuunnos on

$$h_n = \frac{1}{N}\sum_{n=0}^{N-1} H_n e^{-2\pi i k n/N}.$$

12.2 Nopea Fourier-muunnos (FFT)

Karkea arvio 12.1 (2):n vaatimalle laskutyölle saadaan seuraavasti. Merk. $W = e^{2\pi i/N}$, jolloin 12.1 (2) saa muodon

$$H_n = \sum_{k=0}^{N-1} W^{nk} h_k, \ n = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{1}$$

Laskutoimitusten lukum. $H_0, ..., H_{N-1}$:n laskemiseksi $\approx N^2$. (Matriisi $W \times [h_0, ..., h_{N-1}]^T$).

Nopea Fourier-muunnos tekee saman $O(N \log_2 N)$ operaatiolla, Gauss 1800-luku, Danielsson-Lanczos 1940-luku, Cooley-Tukey 1960-luku. Perusidea ilmenee seuraavasta ($W = e^{2\pi i/N}$):

$$F_k = \sum_{j=0}^{N-1} e^{2\pi ijk/N} f_j = \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ik(2j)/N} f_{2j} + \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ik(2j+1)/N} f_{2j+1} =$$

$$\sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ikj/(N/2)} f_{2j} + W^k \sum_{j=0}^{N/2-1} e^{2\pi ikj/(N/2)} f_{2j+1} = F_k^e + W^k F_k^o$$

F_k^e = parilliset komponentit f_j:stä.

F_k^o = parittomat komponentit f_j:stä.

Siis F_k:n lasku palautui F_k^e:n ja F_k^o:n laskuksi.

Sovelletaan samaa rekursiviisesti yhteensä $\log_2 N$ kertaa $\Rightarrow$ laskutyö $N \times \log_2 N$. Divide et impera!

Algm `NR:: four1` s. 507.

12.3 Reaalifunktioiden FFT

FFT soveltuu kompleksilukudatoille h_k, siis myös reaaliluvuille. Miten reaalilukujen tapauksessa voitaisiin toimia tehokkaammin?

Ideoita: a) Pakataan syötteeseen kaksi reaalifunktiota siten, että niiden Fourier-muunnokset voidaan erottaa toisistaan, jolloin saadaan yhdellä kertaa kahden funktion FFT.

b) Pakataan kompl. syötevektori ilman turhia nollia puolta lyhympään kaavioon ja suoritetaan FFT tähän lyhempään vektoriin.

a) Algm `NR:: twofft`. f reaalinen $\Rightarrow$ $F_{N-n} = (F_n)^*$

f imaginaarinen $\Rightarrow G_{N-n} = -(G_n)^*$

b) Annettu reaalinen f_j. Muodostetaan kompleksiluvut $h_j = f_{2j} + if_{2j+1},\ j = 0, 1, ..., N/2 - 1$. Syötetään tämä kompleksidata `NR:: four1`:lle, jolloin saadaan $H_n = F_n^e + iF_n^0,\ n = 0, ..., N/2 - 1$. Tästä voidaan F_n:t laskea (NR s.512 (12.3.5)).

Algm `NR:: realft` s.513

Nopea sini/kosini muunnos

Datan $f_j,\ j = 0, ..., N-1$ *sini- ja kosinimuunnokset* määritellään kaavoin

$$(1) \qquad F_k = \sum_{j=1}^{N-1} f_j \sin(\pi jk/N),\ F_k = \sum_{j=0}^{N-1} f_j \cos(\pi jk/N).$$

Miten nämä lasketaan FFT:n avulla?

Idea: Tehdään uusi funktio, jonka FFT on sinimuunnos.

Määritellään uusi laajennettu funktio

$$(2) \qquad f_{2N-j} \equiv -f_j,\ j = 0, 1, ..., N-1.$$

Laajennetun ftion FFT

$$(3) \qquad F_k = \sum_{j=0}^{2N-1} f_j e^{2\pi ijk/(2N)}.$$

Osasumma $j = N \to 2N - 1$ voidaan muokata seuraavasti

(4)
$$\sum_{j=N}^{2N-1} f_j e^{2\pi ijk/(2N)} = \sum_{j=1}^{N} f_{2N-j} e^{2\pi i(2N-j)k/(2N)} = -\sum_{j=0}^{N-1} f_j e^{-2\pi ijk/(2N)}$$

josta

(5) $$F_k = \sum_{j=1}^{N-1} f_j [e^{2\pi ijk/(2N)} - e^{-2\pi ijk/(2N)}] = 2i \sum_{j=0}^{N-1} f_j \sin(\pi jk/N)$$

Näin on sinimuunnoksen lasku palautettu FFT:hen.

Yo. temppu on sama, jolla annetulle ftiolle löydetään pelkästään sin-termejä sisältävä Fourier-sarja. Vastaavasti voidaan myös kosinimuunnos palauttaa FFT.hen.

NR:n algoritmit `NR::snft` ja `NR::cosft` tekevät yo. muunnokset kuitenkin tehokkaammin kuin yllä ks. NR s. 516-518.

Muita FFT:hen palautuvia. Konvoluutio, korrelaatio.

FFT:n eräs sovellus on signaalin pelkistäminen kohinaisesta datasta. Tähän liittyvä demo-ohjelma `myfrexa.cpp` on www-sivulla.

13 DATAN TILASTOLLINEN ANALYYSI

-keskiarvo, moodi, mediaani

-jakaumien samuuden testaus, korrelaatio

-datan silitys

13.1. Jakauman momentit

Keskiarvo $\overline{x} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} x_j$

Varianssi $Var(x_1,..,x_N) = \frac{1}{N-1}\sum_{j=1}^{N}(x_j - \overline{x})^2$; $\sigma(x_1,...,x_N) = \sqrt{Var(x_1,..,x_N)}$

$\mathrm{ADev}(x_1,..,x_N) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}|x_j - \overline{x}|$

Skew $(x_1,..n_N) = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(\frac{x_j-\overline{x}}{\sigma})^3$

$\mathrm{Kurt}(x_1,..,x_N) = -3 + \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}(\frac{x_j-\overline{x}}{\sigma})^4$

Huom. $Var(x_1,..,n_N) = \frac{1}{N-1}[\sum_{j=1}^{N} x_j^2 - N\overline{x}^2]$, mutta tämä kaava ei pyöristysvirheiden vuoksi ole yhtä hyvä kuin yo. määritelmä (ks. Knuth II s.216)

Algm `NR::moment` s.613

13.2 Mediaani

Määr.

$$\int_{-\infty}^{x_{med}} p(x)dx = \frac{1}{2} = \int_{x_{med}}^{\infty} p(x)dx$$

Jos havainnot $x_1,..,x_N$, niin x_{med} on näistä keskimmäinen.

13.3 Varianssit, keskiarvot

-Studentin t-testi kahden eri datan keskiarvojen eroavuuden mittaamiseen (kun varianssi ajatellaan samaksi). Algm `NR::ttest`

-t-testi keskiarvojen eroavuuden mittaamiseen kun varianssit eivät samoja. Algm `NR::tutest`, `NR::tptest`, `NR::ftest`

13.4 Ovatko jakaumat samat?

-ryhmitetty data - χ^2 testi
-jatkuva data - Kolmogorov-Smirnov

χ^2-testi

-N_i havaintojen määrä i:nnessä ryhmässä, $N_i \in N$, n_i odotettu lukumäärä i:nnessä ryhmässä (esim. tunnetun jakauman antamana), $n_i \in N$

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(N_i - n_i)^2}{n_i}$$

-jos χ^2 on suuri, on hypoteesi H_0: "havainnot jakautuneet em. tunnetun jakauman mukaan" väärä
-vapausasteiden lukumäärä = ryhmien lukumäärä
Algm `NR::chsone` s. 621
Yllä verrattiin havaintoja tunnettuun jakaumaan.
Jos halutaan tutkia kahta eri dataa ja selvittää ovatko kummankin jakaumat keskenään samat, void. myös käyttää χ^2-testiä. Algm `NR::chstwo` s.622.

Kolmogorov-Smirnov

Algm `NR::ksone, kstwo`

13.5 Datan silitys

Jos data on sekavaa tai vaihtelut suuria, voi datan yleisten muodon tai "tendenssin" näkeminen olla vaikeaa. Näissä tilanteissa saataa olla eduksi kokeilla erilaisia visualisointitekniikoita, joita ovat mm. erilaisia data approksimoivien käyrien piirtäminen (esim. PNS-käyrät).

14 DATAN MALLINTAMINEN

Perustehtävä: Annettu pisteparit $(x_i, y_i),\ i = 1, ..., N$, jossa y_i:n ajatellaan olevan muotoa $f(x_i, a_1, ..., a_M)$. Miten parametrit a_i on valittava, jotta y_i:t sopivat mahdollisimman hyvin malliin $f(x_i, a_1, ..., a_M)$?

Mittausvirheiden vaikutus voidaan myös huomioida.

Malli on *lineaarinen*, jos se riippuu lineaarisesti parametreista a_i, muuten *epälineaarinen.*

Esim. Lineaarinen malli $f(x, a_1, ..., a_M) = \sum_{i=1}^{M} a_i x^i$.

Epälineaarinen malli $f(x, a_1, a_2) = a_1 exp(-a_2 x) + exp(-x)$.

Sovituksen hyvyyskriteerinä on tavallisesti neliösumma

$$S = \sum_{i=1}^{N} (y_i - f(x_i, a_1, ..., a_M))^2$$

tai sen jokin variantti (Gaussin pns-menetelmä).

14.1 Normaaliyhtälöt

Olkoon annettu pisteparit $(x_i, y_i),\ i = 1, ..., N$. Tällöin ajatellaan tavallisesti, että x_i on lukuarvona tarkka, kun taas y_i on "mitattu"suure, joka voi olla epätarkka esim. mittausjärjetelyistä johtuen. Olkoon σ_i y_i:n stand. poikkeama. Mallin $y(x_i, a_1, ..., a_M)$ sovittamiseksi mittauspisteistöön tarkastellaan suuretta

$$S(a) = \sum_{i=1}^{N} (\frac{y_i - y(x_i, a_1, ..., a_M)}{\sigma_i})^2,$$

joka halutaan minimoida. Tämä suure noudattaa (perustelu:tn. laskenta) χ^2-jakaumaa vap.astein $N - M$. Välttämätön ehto suureen S minimoinnille on $\frac{\partial S}{\partial a_i} = 0,\ i = 1, ..., M$ eli *normaaliyhtälöt*

$$(1) \qquad \begin{cases} \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i - y(x_i, a_1, ..., a_M)}{\sigma_i^2} \frac{\partial y(x_i, a_1, ..., a_M)}{\partial a_k} = 0 \\ k = 1, ..., M \end{cases}$$

14.2. PNS-suora

Nyt mallina on $y = a + bx$ missä a ja b halutaan estimoida datasta $(x_i, y_i),\ i = 1, ..., N$. Normaaliyhtälöt 14.1 (1) antavat nyt helposti a:n ja b:n (ks. NR s.662).

Algm `NR::fit` s.665

14.3 Yleinen lin. PNS

Mallina on $y = \sum_{k=1}^{M} a_k X_k(x)$ missä X:t ovat mieliv. funktioita (ei tarvitse olla lin.). Normaaliyhtälöt 14.1 (1) antavat nyt vaatimuksen

$$0 = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}[y_i - \sum_{j=1}^{N} a_j X_j(x_i)]X_k(x_i),\ \forall k = 1, ..., M$$

tai lyhyesti $\sum_{j=1}^{M} \alpha_{kj} a_j = \beta_k$, missä $\alpha_{kj} = \sum_{i=1}^{N} \frac{X_j(x_i)X_k(x_i)}{\sigma_i^2}$, $\beta_j = \sum_{i=1}^{N} \frac{y_i X_k(x_i)}{\sigma_i^2}$ tai

$$[\alpha] = A^\top \cdot A,\ [\beta] = A^\top \cdot \beta,\ A_{ij} = X_j(x_i)/\sigma_i$$

Sama matriisimuodossa $[\alpha]a = [\beta]$ eli $(A^\top \cdot A)a = A^\top b$

$$a_j = \sum_{k=1}^{n} [\alpha]_{jk}^{-1} \beta_k = \sum_{k=1}^{n} C_{jk}[\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i X_k(x_i)}{\sigma_i^2}]$$

$[\alpha]^{-1}$ löydet. LU-hajoitelman avulla.

Algm `NR::lfit` s.674

Huom. Algm `NR::lfit` sovittaa dataan $(x[i], y[i])$ annettujen kantafunktioiden $X_j(x),\ j = 1, ..., MA$, lineaarikombinaation $u = \sum A_j X_j(x)$ (lin. malli), jossa on MA kpl kertoimia A_j. Näistä osa voidaan pitää kiinteinä. Varioivat parametrit annetaan taulukon IA avulla, jos IA[j]= 0, niin A_j on kiinteä, muulloin se varioi. (NR, s.674)

SVD pns-sovituksessa

Merk. $A = [X_j(x_i)/\sigma_i]$ kuten edellä. Pns-sovituksen perustehtävä on seuraava:

Etsi a, joka minimoi suureeen $\chi^2 = [A \cdot a - b]^2$.

Olk. A:lla SVD (A on $N \times M$, W on $M \times M$ ja V on $N \times N$ matr.)

$$A = UWV^\top$$

Olk. $U_{(i)},\ V_{(i)},\ i = 1, ..., M$, U ja V:n sarakeet.

Palautetaan mieleen (NR s.65) yhtälön $A \cdot a = b$ SVD-ratk.

$$a = V \cdot diag(1/w_j) \cdot U^\top(b).$$

Tämä voidaan ilmaista A:n pseudoinverssin A^+ avulla myös muodossa $a = A^+b$. Yo. merkinnöin

$$a = \sum_{i=1}^{n}(\frac{U_{(i)} \cdot b}{w_i})V_{(i)} \pm \frac{1}{w_1}V_{(1)} \pm ... \pm \frac{1}{w_n}V_{(M)}.$$

Singulaariarvojen editointimenettelyä, jota jo luvussa 2 tarkasteltiin, voidaan käyttää myös tässä yhteydessä. Jos $w_i = 0$ niin aset. $1/w_i = 0$ (vrt. NR s.62, 677). Samoin tehdään jos $abs(w_i) < N\times$ kone-eps.

Algm `NR::svdfit` s.678.

Huom. Luvussa 3 esitelty algoritmi `NR::mypolfit` käyttää osanaan algoritmia `NR::svdfit`.

Huom. Joskus epälineaarinen malli voidaan linearisoida ts. muuntaa lineaariseksi. Esim. malli $y = x^a$, a estimoitava parametri, muuntuu muotoon $z = \log y = a \log x$ joka on lineaarinen.

Yleisemmin, jos f on homeomorfismi niin malli $y = f(ax)$, a parametri, void. linearisoida ottamalla $F^{-1}:\ z = f^{-1}(y) = ax$. Jos epälin. malli on laskennallisesti vaikea, voi yrittää mallin korvaamista yksinkertaisemmalla (vrt. kohdefunktion kvadraattinen approksimaatio minimin läheisyydessä optimointialgoritmeissa). Ma-

temaattisesti tämä merkitsee funktion korvaamista sopivalla esim. Taylor-approksimaatiolla.

14.4 Marquardtin menetelmä

Dataan $(x_i, y_i),\ i = 1, ..., N$ sovit. malli $y(x_i, a)$, joka on epälin. param. vektorin $a = (a_1, ..., a_n)$ suhteen. Toiminta-ajatus on, kuten tavallista, kohdefunktion

$$\chi^2(a) = \sum_{i=1}^{N} (y_i - y(x_i, a))^2 / \sigma_i^2$$

minimointi. Koska malli on nyt epälineaarinen, normaaliyhtälöitä 14.1 (1) ei voida suoraan ratkaista. Näin ollen käytetään jotakin sopivaa iteratiivista miniminhakualgoritmia. Periaatteeessa menetellään samoin kuin optimointiteoriassa, mutta pyrkien käyttämään hyväksi kohdefunktion ylläolevaan muotoon sisältyvää informaatiota (Hessen matriisi).

Marquardtin (-Levenbergin) menetelmässä ideana on vaihdella joustavasti tilanteen mukaan kahden minimointimenetelmän, jyrkimmän vähenemisen ja Newton-tyyppisen menetelmän välillä.

Merkitään

$$\beta_k = -\frac{1}{2}\frac{\partial \chi^2}{\partial a_k} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial y(x_i, a)}{\partial a_k}[y_i - y(x_i, a)]/\sigma_i^2$$

$$\alpha_{kl} = \frac{1}{2}\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial a_k \partial a_l} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2}[\frac{\partial y(x_i, a)}{\partial a_k}\frac{\partial y(x_i, a)}{\partial a_l} - (y_i - y(x_i, a))\frac{\partial^2 y(x_i, a)}{\partial a_l \partial a_k}]$$

Newton-tyyppinen menetelmä: Annetaan parametrille a korjaus $\delta a = (\delta a_1, ..., \delta a_M)$, joka määräytyy yhtälöstä

$$\sum_{i=1}^{M} \alpha_{kl} \delta a_l = \beta_k.$$

Jyrkimmän vähenemisen menetelmä: Annetaan a:lle korjaus

$$\delta a_l = vakio \times \beta_k.$$

Jatkoa varten **muutetaan** α_{kl}:n määritelmää niin, että jätetään pois 2. kertaluvun osittaisderivaatat (stabiliteetin parannusyritys) ts. asetetaan

$$\alpha_{kl} = \sum_{i=1}^{N} \frac{1}{\sigma_i^2} \frac{\partial y(x_i, a)}{\partial a_k} \frac{\partial y(x_i, a)}{\partial a_l}.$$

Määritellään myös

$$\alpha'_{jj} = \alpha_{jj}(1 + \lambda),\ \alpha'_{jk} = \alpha_{jk},\ j \neq k.$$

Marquardtin algoritmi (1963)

1. Annetaan alkuarvaus a:lle, valitaan $\lambda = 0.001$

2. Ratkaistaan δa:n suhteen $\sum_{i=1}^{n} \alpha'_{kl} \delta a_l = \beta_k$

3. Jos $\chi^2(a + \delta a) \geq \chi^2(a)$, niin $\lambda \leftarrow 10 * \lambda$ ja palataan 2.een

4. Jos $\chi^2(a+\delta a) < \chi^2(a)$, niin $\lambda \leftarrow \lambda/10$, $a \leftarrow a+\delta a$ ja palataan 3:een mikäli lopetusehto ei toteudu.

Huom. Tapauksessa $\lambda \sim 0$ Marquardtin menetelmä toimii lähes samoin kuin Newtonin menetelmä, ja tapauksessa λ suuri kuten steepest descent.

Algm `NR::mrqmin` s.685

Huom. Tässä algoritmissa on mahdollista, kuten `NR::lfit`:ssä kiinnittää eräitä parametrejä ja varioida haluttuja.

```
/* FILE: ch14ex1.c begins */
/*
 gcc ch14ex1.c -L../lib -I../util -o a -lm -lnr
*/

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>

#define NRANSI

#include "../util/nr.h"
#include "../util/nrutil.h"
#include "../util/matutl6.c"
```

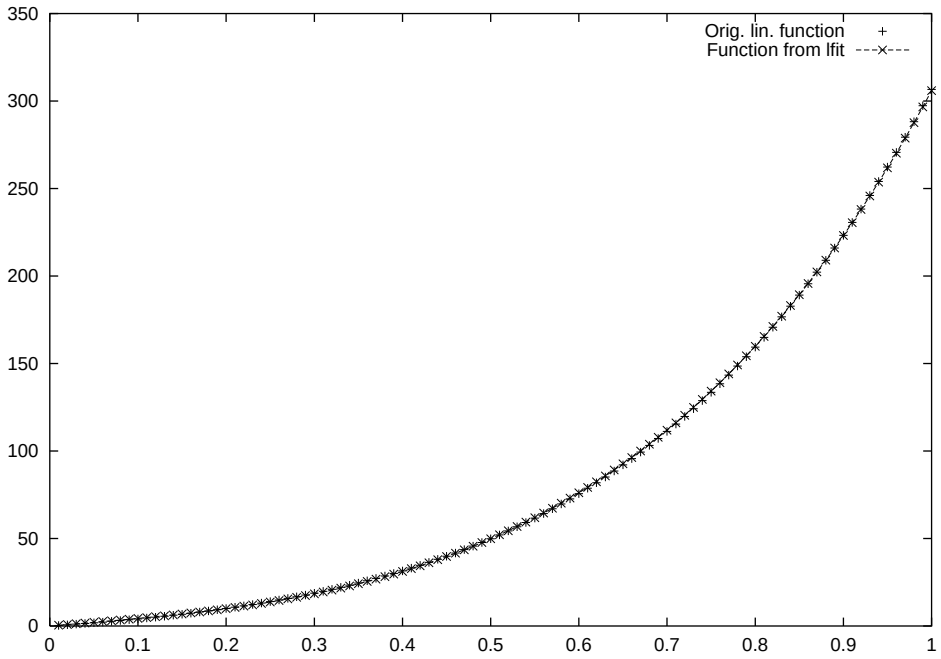
```
 #include "../gnuplot/gnuplt2t.c"


#define NP 100
#define P1 5


/* compute p:th power of x for lfit */
void powers(float x, float pows[], int p)
{
  int i;
  float xp = 1.0;
  for (i = 1; i <= p; i++)
    {
      xp *= x;
      pows[i] = xp;
    }
}


/* compute value and derivatives (w.r.t. coefficients) of function
 *  lambda_1*exp(-x) + lambda_2*exp(-lambda_3*x)
 *  for mrqmin.
*/
void exps(float x, float *coefs, float *fx, float *dyda, int ma)
{
  *fx = coefs[1]*exp(-x)+coefs[2]*exp(-coefs[3]*x);
  dyda[1] = exp(-x);
  dyda[2] = exp(-coefs[3]*x);
  dyda[3] = -coefs[2]*x*exp(-coefs[3]*x);
}


int main()
{
  int i, j, ia[P1+1], iaa[4];
  float chisq1, chisq2, chisq2a, alambda, sum, x, xtop;
  float *xi, *yi1, *yi2, *yi2a, *li1, *li2, *yi1data, *yi2data,
    *li1fit, *li2fit, *li2fitc, *sig;
  float **covar, **alpha;
  FILE *tmpfile1, *tmpfile2;

  /* initialize random number generator */
  unsigned int seed = time(NULL);
  srand(seed);
```

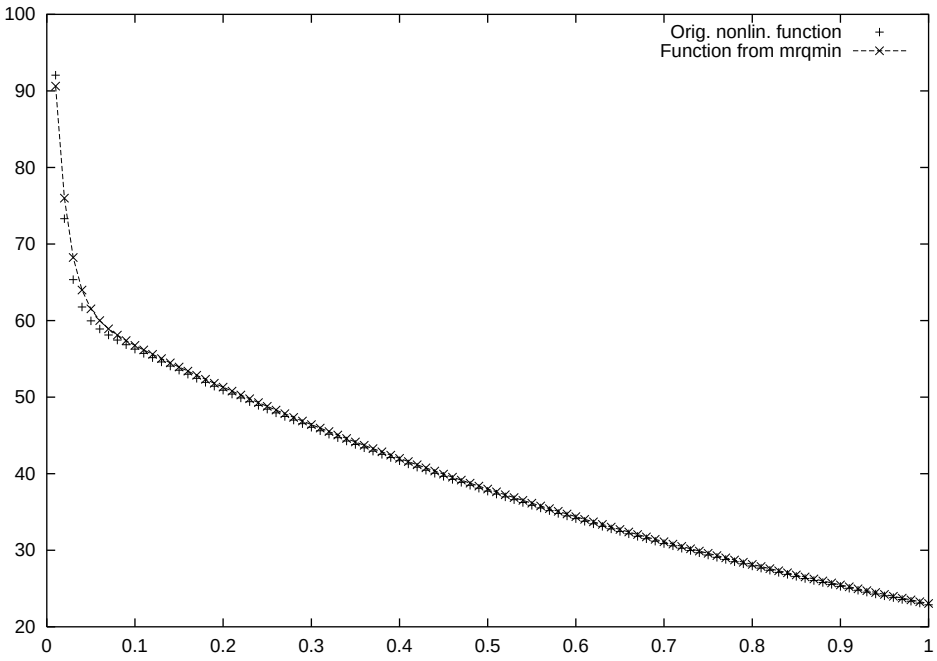
```
xi = vector(1, NP);
yi1 = vector(1, NP);
yi2 = vector(1, NP);
yi2a = vector(1, NP);
yi1data = vector(1, NP);
yi2data = vector(1, NP);
sig = vector(1, NP);
li1 = vector(1, P1);
li2 = vector(1, 3);
li1fit = vector(1, P1);
li2fit = vector(1, 3);
li2fitc = vector(1, 3);
covar = matrix(1, NP, 1, NP);
alpha = matrix(1, NP, 1, NP);

/* make random coefficients for the functions */
for (i = 1; i <= P1; i++)
  li1[i] = 100*(float)rand()/(float)RAND_MAX;
for (i = 1; i <= 3; i++)
  li2[i] = 100*(float)rand()/(float)RAND_MAX;

/* compute function values                                    */
/* Now f_1(x) = \sum_{j=1}^p \lambda_j x^j                    */
/* and f_2(x) = \lambda_1 e^{-x} + \lambda_2 e^{-\lambda_3 x} */
for (i = 1; i <= NP; i++)
  {
  x = (float)i*0.01;
  xi[i] = x;
  xtop = 1;
  sum = 0;
  for (j = 1; j <= P1; j++)
  {
    xtop *= x;
    sum += li1[j]*xtop;
  }
  yi1[i] = sum;
  yi2[i] = li2[1]*exp(-x)+li2[2]*exp(-li2[3]*x);

  /* std. deviations unknown, set = 1, see NRC, p. 671 */
  sig[i] = 1;
}

/* add random noise to function values, use this as data */
for (i = 1; i <= NP; i++)
```

```
{
  yi1data[i] = yi1[i]*(1+0.1*((float)rand()/(float)RAND_MAX-0.5));
  yi2data[i] = yi2[i]*(1+0.1*((float)rand()/(float)RAND_MAX-0.5));
}

/* ia[] tells lfit which coefficients to fit */
for (i = 1; i <= P1; i++)
  ia[i] = 1;

/* fit polynomial */
lfit(xi, yi1data, sig, NP, li1fit, ia, P1, covar, &chisq1, &powers);

alambda = -1;
for (i = 1; i <= 3; i++)
  {
  /* fit all coefficients */
    iaa[i] = 1;
    /* initial guess for coefficient */
  li2fit[i] = li2fitc[i] = 100*(float)rand()/(float)RAND_MAX;
  }

/* compute chi-square for random coefficients */
chisq2a = 0.0;
for (i=1; i<= NP; i++)
  chisq2a += SQR((yi1[i] - li2fit[1]*exp(-xi[i])+
                 li2fit[2]*exp(-li2fit[3]*xi[i]))/sig[i]);

/* fit nonlinear function, see description for mrqmin */
mrqmin(xi, yi2data, sig, NP, li2fit, iaa, 3, covar, alpha,
       &chisq2, &exps, &alambda);

while (alambda > 0.00001)
  mrqmin(xi, yi2data, sig, NP, li2fit, iaa, 3, covar, alpha,
         &chisq2, &exps, &alambda);

alambda = 0;
mrqmin(xi, yi2data, sig, NP, li2fit, iaa, 3, covar, alpha,
       &chisq2, &exps, &alambda);


printf("\n\n\nPOLYNOMIAL:\n\n");
printf("Original coefficients:\n");
for (i = 1; i <= P1; i++)
  printf("%10.4f ", li1[i]);
printf("\n\nCoefficients from lfit:\n");
```

```
for (i = 1; i <= P1; i++)
  printf("%10.4f ", li1fit[i]);
printf("\n\nChi-square = %10.4f\n", chisq1);
printf("\n\nNON-LINEAR FUNCTION:\n\n");
printf("Original coefficients:\n");
for (i = 1; i <= 3; i++)
  printf("%10.4f ", li2[i]);
printf("\n\nRandom coefficients:\n");
for (i = 1; i <= 3; i++)
  printf("%10.4f ", li2fitc[i]);
printf("\n\nChi-square for random coefficients= %10.4f\n", chisq2a);
printf("\nCoefficients from mrqmin:\n");
for (i = 1; i <= 3; i++)
  printf("%10.4f ", li2fit[i]);
printf("\n\nChi-square = %10.4f\n\n\n", chisq2);
tmpfile1 = fopen("tmp1.dat","w");
tmpfile2 = fopen("tmp2.dat","w");
for (i=1; i<=NP; i++)
  {
    fprintf(tmpfile1,"%g %g\n",xi[i],yi1[i]);
  sum = 0;
  x = xi[i];
  xtop = 1;
  for (j = 1; j <= P1; j++)
    {
    xtop *= x;
    sum += li1fit[j]*xtop;
    }
  fprintf(tmpfile2,"%g %g\n",xi[i],sum);
  }
fclose(tmpfile1);
fclose(tmpfile2);
gnuplt2t(3, "tmp1.dat", "Orig. lin. function", 1,
         "tmp2.dat", "Function from lfit", 2,NULL);
tmpfile1 = fopen("tmp1.dat","w");
tmpfile2 = fopen("tmp2.dat","w");
for (i=1; i<=NP; i++)
  {
    x = xi[i];
  fprintf(tmpfile1,"%g %g\n",x,yi2[i]);
  fprintf(tmpfile2,"%g %g\n",x,
          li2fit[1]*exp(-x)+li2fit[2]*exp(-li2fit[3]*x));
}
fclose(tmpfile1);
fclose(tmpfile2);
```

```
  gnuplt2t(3, "tmp1.dat", "Orig. nonlin. function", 1,
              "tmp2.dat", "Function from mrqmin", 2,NULL);

  return 0;
}


/* FILE: ch14ex1.c ends */
```




Orig. nonlin. function
Function from mrqmin
100
90
80
70
60
50
40
30
20
0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1

14.6 Robustia estimointia

Perusajatus robustissa estimoinnissa: Ei anneta "pienien"poikkeamien sovitettavasta mallista häiritä.

Kirjan kuva s.700 osoittaa pns- ja robustin estimoinnin eron.

Esimerkkinä on suoran $y = a + bx$ sovitus pisteistöön (x_i, y_i) minimoimalla absoluttiset poikkeamat ts. summa

$$\sum_{i=1}^{N} |y_i - a - bx_i| = \triangle \tag{1}$$

Huom. Pns-sovituksessa kohdefunktio oli χ^2.

Summa $\sum_{i=1}^{P} |c_i - \alpha|$ minimoituu kun $\alpha = c_n$, lukujen c_i mediaani. Näin ollen (1) minimoituu kun

$$a = mediaani\{y_i - bx_i\}, \tag{2}$$

(b kiinteä). Param. b puolestaan valit. s.e. $\frac{\partial \triangle}{\partial b} = 0$ ts.

$$\sum_{i=1} N x_i sgn(y_i - a - bx_i) = 0. \tag{3}$$

Asetetaan tässä a:ksi (2):n antama luku, jolloin $a = a(b, x_i, y_i)$ ja ratk. tämän jälkeen (3) välinpuolit. menetelmällä b:n suhteen. Saatu b sijoit. a:n lausekkeeseen.

Algm `NR::medfit` s.704

15 TAVALLISET DIFFERENTIAALIYHTÄLÖT

15.0 Johdanto

Perusongelma: Annettu jatkuvat $f_i(x, y_1, ..., y_N)$ $i = 1, ..., N$. Etsi y_i, $i = 1, ..., N$ s.e. (huom. tässä ei tarkastella deriv. suorittamista)

$$\frac{dy_i(x)}{dx} = f_i(x, y_1, .., y_N) \ \forall i = 1, ..., N. \tag{1}$$

Esim.

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = x + y_1 + y_2^2 & \text{tai } y'(x) = \frac{\sin x}{x} \\ \frac{dy_2}{dx} = x^2 + y_1^2 + y_2 \end{cases}$$

Tavallisesti (1):n ratk. ei määräydy 1-käsitt. vaan on asetettava lisäehtoja, esim. annetaan $y_i(x_0)$, $i = 1, ..., N$ (ns. **alkuarvotehtävä** AAT) tai $y_i(x_0)$ ja $y_i(x_1)$, $i = 1, ..., N$ ns. **reuna-arvotehtävä** RAT). Olem. olo ja 1-käsitt. lauseilla on keskeinen merkitys myös numeerisessa diff.yht. teoriassa.

AAT:n $y' = f(x, y)$, $y(x_0) = y_0$, numeerinen ratkaisu välillä $[x_0, \overline{x}_0]$, $x_0 < \overline{x}_0$, voidaan tehdä **Eulerin menetelmällä** seuraavasti. Valit. kok.luku $n \geq 3$. Merk. $x_i = x_0 + hi$, $h = (\overline{x}_0 - x_0)/n$ ja aset. $y_{i+1} = y_i + hy_i' = y_i + hf(x_i, y_i)$, $i = 0, 1, 2$. Geom. tulkinta:

Saadaan ratkaisulle likiarvot pisteissä x_i.

Eulerin menetelmä on historiallisesti tärkeä mutta tehoton.

Nykyiset reseptit a) Runge-Kutta

b) Richardsonin ekstrapolointi (Bulirsch-Stoer)

a) Euler-tyylisiä askeleita (lisäpiirteitä tarkkuuden parant.)

b) lasket. useilla askelpituuksilla h ja ekstrapoloidaan rationaalisella approksimaatiolla tapaukseen $h \sim 0$

NR erottaa algoritmien 3 tasoa:

$\rightarrow$ eteneminen yhden tai useamman askeleen valitulla algoritmilla (`NR::rk4;mmid`)

$\rightarrow$ askelpituuden säätö (`NR::rkqc,bsstep`)

$\rightarrow$ ajuriohjelma (`NR::rkdumb, odeint`)

15.1. Runge-Kutta

Lähtökohtana Eulerin menetelmä

$$x_{n+1} = x_n + h,$$

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n) = y_n + k_1.$$

Otetaan keskelle koeaskel

$$k_2 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2}),$$

$$y_{n+1} = y_n + k_2 + O(h^3). \tag{1}$$

Kaava (1) antaa 2. kertaluvun R-K menetelmän. Yleensa sanotaan että menetelmä on kertalukua n, jos virhe $= O(h^{n+1})$.

Jatketaan yo. kaavoja

$$k_3 = hf(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2}),$$

$$k_4 = hf(x_n + h, y_n + k_3).$$

Määrit.

$$y_{n+1} = y_n + \frac{k_1}{6} + \frac{k_2}{3} + \frac{k_3}{3} + \frac{k_4}{6} + O(h^5). \tag{2}$$

Tämä on 4. kertaluvun R-K menetelmä. Kertoimien $\frac{1}{6}, \frac{1}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{6}$ valintaa (2):ssa voidaan perustella Taylor-kehitelmiä tutkimalla.

Algm `NR::rk` 4 s.712 Ajuri `NR::rkdumb`

15.2 R-K adaptiivisella askelpituudella

Tavoite: Saavuttaa ennalta annettu tarkkuus mahdollisin vähin laskuin. Tavoitteeseen pyritään askelpituuden säädöllä [virhearvio]

Askeleen puolitus 4. kertaluvun R-K:n kanssa.

Olk. tarkka ratk. y ja sille approksimaatio y_1 kun edet. x:stä $x+2h$:hon ja appr. y_2 kun edet. ensin $x+h$:hon ja sitten $x+h$:sta $x+2h$:hon. Koska menetelmä on kertalukua 4, saadaan

$$y(x+2h) = y_1 + (2h)^5(\phi) + O_1(h^6),$$

$$y(x+2h) = y_2(x+h) + h^5\phi + O_2(h^6)$$

$$= y_2(x) + h^5\phi + O_3(h^6) + h^5\phi + O_2(h^6) = y_2 + 2h^5\phi + O_4(h^6).$$

Lauseke

$$\triangle = y_2 - y_1 = 30\phi h^5 + O(h^6)$$

antaa virhearvion. Olk. h_0 toinen askelpituus ja sitä vastaava virhe $\triangle_0$. Silloin

$$h_0 \backsimeq h_1 |\frac{\triangle_0}{\triangle_1}|^{1/5}.$$

Jatkossa $\triangle_0$ on *haluttu tarkkuus*. Kaava (1) kertoo:

-jos $\triangle_1 > \triangle_0$: paljonko vähennettävä askelpituutta h_1 kun yritetään saavuttaa haluttu tarkkuus

-jos $\triangle_1 < \triangle_0$: paljonko voidaan kasvattaa askelpit. h_1 ja silti saavuttaa haluttu tarkkuus

Johtopäätös: Kaava (1) soveltuu diff. yht. ratkaisun "laaduntarkkailuun". Askelpituus valit. kussakin vaiheessa mahdollisimman suureksi niin että haluttu tarkkuus saavutetaan:

Algm `NR::rkqs` s. 719

Algm `NR::odeint` s.721

```
// FILE: myod1.cpp begins
// g++ myod1.cpp -I../utils -I../democpp02 -L../lib -o a -lm -lnr

/*
  The hypergeometric function F(a,b;c;x) satisfies
```

```
  dF(a,b;c;x)/dx = (ab/c)F(a+1,b+1;c+1;x) and F(a,b;c;0) =1.
  (See Chapter 6.)
  For x in (0,1) and a,b in (0,1)
  dF(a-1,b;c;x)/dx = (a-1)[F(a,b;c;x) -F(a-1,b;c;x)]/x
  dF(a,b;c;x)/dx = [(c-a)F(a-1,b;c;x) +(a-c+b x)F(a,b;c;x)]/(x(1-x))
  Hence the IVP

  dy1(x)/dx = (a-1)[ y2(x) -y1(x) ]/x
  dy2(x)/dx = [(c-a) y1(x) +(a-c+bx)y2(x) ]/(x(1-x))

  y1(x1)= F(a-1,b;c;x1)
  y2(x1)= F(a,b;c;x1)

  has solution y1 =F(a-1,b;c;x) y2 =F(a,b;c;x)
*/
// Driver for routine odeint

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>

#include <cmath>
#include "nr.h"
#include "matutl02.cpp"

using namespace std;

#define N 2
#define KMAX 100

DP dxsav;  // defining declarations
int kmax,kount;
Vec_DP *xp_p;
Mat_DP *yp_p;

int nrhs;   // counts function evaluations

DP  a= 0.7, b=0.5, c=1.5;

void derivs(DP x,const Vec_DP &y,Vec_DP &dydx)
{
```

```
  nrhs++;
  dydx[0] =(a-1.0)*(y[1]-y[0])/x;
  dydx[1]=((c-a)*y[0]+(a-c+b*x)*y[1])/(x*(1.0-x));
}

DP hyperg(DP a, DP b,DP c, DP x)
{
  complex<DP> ser,der,aa(a,0.0),bb(b,0.0),cc(c,0.0),xx(x,0.0);
  if (x>0.99) x=0.99;
  NR::hypser(aa,bb,cc,xx,ser,der);
  return ser.real();
}

int main(void)
{
  int i,nbad,nok;
  DP eps=1.0e-4,h1=0.1,hmin=0.0,x1=0.01,x2=0.99;
  DP tmp;   // eps is the desired accuracy
  complex<DP> tmp2;
  Vec_DP ystart(N);
  xp_p=new Vec_DP(KMAX);
  yp_p=new Mat_DP(N,KMAX);
  Vec_DP xp=*xp_p;
  Mat_DP yp=*yp_p;
  ystart[0]=hyperg(a-1.0,b,c,x1);
  ystart[1]=hyperg(a,b,c,x1);
  nrhs=0;
  kmax=100;
  dxsav=(x2-x1)/20.0;
  NR::odeint(ystart,x1,x2,eps,h1,hmin,nok,nbad,derivs,NR::rkqs);
  cout<<"successful steps:"<<setw(15)<<nok<<endl;
  cout<<"bad steps:"<<setw(22)<<nbad<<endl;
  cout<<"function evaluations:"<<setw(11)<<nrhs<<endl;
  cout<<endl<<"stored intermediate values:    "<<kount<<endl;
  cout<<endl;
  cout<<"         x           integral       F(a,b;c;x)        Error";
  cout<<endl;
  for (i=0;i<kount-1;i++){
    tmp=hyperg(a,b,c,(*xp_p)[i]);
    cout<<setw(10)<<(*xp_p)[i]<<setw(17)<<(*yp_p)[1][i]<<setw(15);
    cout<<tmp<<setw(20)<<tmp-(*yp_p)[1][i]<<endl;
  }
  return 0;
}
// FILE: myod1.cpp ends
```

```
successful steps:              3
bad steps:                     9
function evaluations:        117

stored intermediate values:    9

         x           integral       F(a,b;c;x)        Error
      0.01            1.00235        1.00235                0
      0.11            1.02722        1.02722          1.64666e-06
  0.324758            1.09176        1.09177          2.64781e-06
  0.641458            1.23791        1.23795          4.09625e-05
  0.702466            1.27996           1.28          3.73756e-05
  0.778566            1.34513        1.34516          3.33739e-05
  0.865942            1.45088        1.45091          2.85362e-05
  0.932215            1.58244        1.58247          2.48521e-05
```

NR::odeint soveltuu myös määrättyjen integraalien laskuun erit. jos integrandissa on rajuja vaihteluja.

Huom. Algm NR::rkqs:ssa kaavaa (1) käytetään muokatussa muodossa.

```
// FILE: myod2.cpp begins
//   We use odeint to compute
//   int_{x1}^{x2} 100*sin(pi*x)
// Driver for routine odeint
//  g++ myod2.cpp -I../utils -I../democpp02 -L../lib -o a -lm -lnr

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>

#include <cmath>
#include "nr.h"
#include "matutl02.cpp"

using namespace std;

#define N 1
```

```
#define KMAX 100

DP dxsav;  // defining declarations
int kmax,kount;
Vec_DP *xp_p;
Mat_DP *yp_p;

int nrhs;   // counts function evaluations


void derivs(DP x,const Vec_DP &y,Vec_DP &dydx)
{
  nrhs++;
  dydx[0] =100.0*sin(M_PI*x);
}

int main(void)
{
  int i,ii,nbad,nok;
  DP eps=1.0e-4,h1=0.1,hmin=0.0,x1=0.0,x2=1.0;
  DP tmp;   // eps is the desired accuracy
  Vec_DP ystart(N);
  xp_p=new Vec_DP(KMAX);
  yp_p=new Mat_DP(N,KMAX);
  for (ii=1;ii<=6;ii++){
    eps =eps/5.0;
    ystart[0]=0.0;
    nrhs=0;
    kmax=100;
    dxsav=(x2-x1)/20.0;
    NR::odeint(ystart,x1,x2,eps,h1,hmin,nok,nbad,derivs,NR::rkqs);
    cout<<endl<<endl<<"eps = "<<eps;
    cout<<endl<<"successful steps:"<<setw(15)<<nok<<endl;
    cout<<"bad steps:"<<setw(22)<<nbad<<endl;
    cout<<"function evaluations:"<<setw(9)<<nrhs<<endl;
    cout<<endl<<"stored intermediate values:    "<<kount<<endl;
    cout<<endl;
    cout<<"        x            integral          Error"<<endl;
    Vec_DP xp=*xp_p;
    Mat_DP yp=*yp_p;
    for (i=0;i<kount;i++) {
      tmp=100*(cos(M_PI*x1)-cos(M_PI*xp[i]))/M_PI;
      cout<<setw(10)<<xp[i]<<setw(17)<<yp[0][i];
      cout<<setw(16)<<yp[0][i]-tmp<<endl;}
  }
```

```
  return 0;
}
// FILE: myod2.cpp ends


eps = 2e-05
successful steps:             17
bad steps:                     1
function evaluations:      153

stored intermediate values:    6

        x             integral          Error
         0                    0              0
 0.0952162              1.41352   -5.10758e-08
  0.258262              9.91483    -4.3075e-06
  0.475795              29.4128   -1.60266e-05
  0.736166              53.3397     9.5355e-06
         1              63.6621    9.03394e-05


eps = 4e-06
successful steps:             20
bad steps:                     1
function evaluations:      196

.......................
```

15.3 Modifioitu keskipistemenetelmä

Idea: Edetään pisteestä x pisteeseen $x+H$ jonolla n kpl peräkk. osa-askelia, joiden pituus on $h = H/n$.

$$\begin{cases} z_0 = y(x) \\ z_1 = z_0 + hf(x, z_0) \\ z_{m+1} = x_{m-1} + 2hf(x + mh, z_m),\ m = 1, 2, .., n-1 \\ y(x+H) \approx y_n \equiv \frac{1}{2}[z_n + z_{n-1} + hf(x+H, z_n)] \end{cases}$$

Vrt. Euler R-K.

Algm `NR::mmid` s.723 on tarkoitettu lähinnä käytettäväksi Bulirsch-Stoerin menetelmä kanssa (myös)

15.4 Richardsonin ekstrapolointi ja Bulirsch-Stoerin menetelmä

Menetelmä ei sovellu tapaukseen, missä dy sisältää ei-sileitä funktioita (esim. taulukoituja tai mitattuja) tai singulariteettejä integrointivälillä.

Bulirsch-Stoerin menetelmän 3 piirrettä:

1) Richardsonin ekstrapolointi (vrt. Rombergin menetelmä numeerisessa integroinnissa): Numeerisen laskun vastaus $v(h)$ riippuu parametristä h analyyttisesti (h esim. askelpituus). Tunnetaan $v(h_i),\ i = 1, ..., p$, ekstrapoloidaan arvoon $h = 0$ sovittamalla dataan $(h_i, v(h_i)),\ i = 1, ..., p$, jokin "luonnollinen"käyrä.

2) Sovitettava käyrä on rationaalifunktio (Bulirsch-Stoer)

3) Käytet. menetelmää, jonka virheftio on parillinen (vrt. NR s.723, Gragg)

Parametriä h pienennetään käyttämällä tark. välin $(x, x + H)$ kulkemiseen n_j askelta, ts. $h_j = H/n_j$, missä $n_j = 2n_{j-2},\ n = 2, 4, 6, 8, 12, 16, 24, 32, 48, 64, 96$.

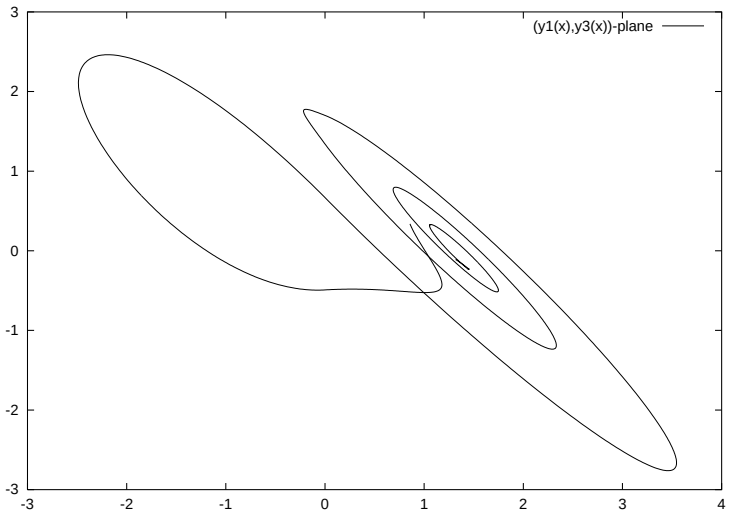
Algm `NR::bsstep`

```
// FILE: myod3.cpp begins
// Driver for routine odeint
// Example from Sewell ISBN 0-12-637475-9 p. 63
//  g++ myod3.cpp -I../utils -I../democpp02 -L../lib -o a -lm -lnr
#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>

#include <cmath>
#include "nr.h"
```

```
#include "matutl02.cpp"

using namespace std;

#define N 1
#define KMAX 100

DP dxsav;  // defining declarations
int kmax,kount;
Vec_DP *xp_p;
Mat_DP *yp_p;

int nrhs;   // counts function evaluations

void derivs(DP x,const Vec_DP &y,Vec_DP &dydx)
{
  nrhs++;
  dydx[0] = 100.0 / (1.0 + 10000.0 * x * x);
}

int main(void)
{
  int i, nbad, nok;
  DP eps = 1.0e-4, h1 = 0.1, hmin = 0.0,
    x1 = -1.0, x2 = 2.0;
  DP sol;
  Vec_DP ystart(N);
  xp_p=new Vec_DP(KMAX);
  yp_p=new Mat_DP(N,KMAX);
  ystart[0] = atan(-100.0);
  nrhs = 0;
  kmax = 100;
  dxsav = (x2 - x1) / 20.0;
  NR::odeint(ystart, x1, x2, eps, h1, hmin, nok, nbad, derivs,
         NR::rkqs);
  printf("\n%s %13s %3d\n", "successful steps:", " ", nok);
  printf("%s %20s %3d\n", "bad steps:", " ", nbad);
  printf("%s %9s %3d\n", "function evaluations:", " ", nrhs);
  printf("\n%s %3d\n", "stored intermediate values:    ", kount);
  printf("\n%8s %18s %15s  %10s\n",
         "x", "integral", "atan(100*x)", "Error");
  Vec_DP xp=*xp_p;
  Mat_DP yp=*yp_p;

  for (i = 0; i < kount; i++)
```

```
  {
    sol = atan(100.0 * xp[i]);
    printf("%10.4f %16.6f   %14.6f  %12.4e\n",
           xp[i], yp[0][i], sol, yp[0][i] - sol);
  }
  return 0;
}
// FILE: myod3.cpp ends


successful steps:                12
bad steps:                       13
function evaluations:           215

stored intermediate values:       9

       x           integral     atan(100*x)       Error
   -1.0000        -1.560797        -1.560797    0.0000e+00
   -0.4000        -1.545827        -1.545802   -2.5712e-05
   -0.1863        -1.517212        -1.517185   -2.7585e-05
   -0.0301        -1.249923        -1.249887   -3.6121e-05
    0.1262         1.491761         1.491712    4.8518e-05
    0.3511         1.542385         1.542325    5.9654e-05
    0.6179         1.554678         1.554613    6.4309e-05
    1.1340         1.562047         1.561978    6.8324e-05
    2.0000         1.565866         1.565796    6.9805e-05
```

Seuraava esimerkki havainnollistaa kappaleen liikerataa 3-ulotteisesssa avaruudessa, kun nopeus on annettu. Riippuen nopeuden lausekkeesta, liikerata voi olla hyvinkin kaaoottinen, vrt. kuva.




```
// FILE: myod4.cpp begins
// Driver for routine rkdumb
// Studies the Silnikov system of ODE's.
// See Kocak, p. 148
/*  g++ -Wall myod4.cpp -L../lib -I../utils -I../gnuplot02 -o a -lm -lnr  */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cmath>

using namespace std;

#include "nr.h"
#include "matutl02.cpp"


#define PRINT 1
#include "gnuplt2.h"


#define NVAR 3
#define NSTEP 2000

DP agl=0.33, bgl=0.75, cgl=0.63, dgl=0.0; // Define global variables
```

```
DP f(DP x)
{
  DP r =1.0-bgl*x;
  if (x <=0) r=1.0+cgl*x;
  return r;
}

void derivs(DP x,const Vec_DP &y,Vec_DP &dydx)
{
  dydx[0] = y[1];
  dydx[1] = y[2];
  dydx[2] =-y[1]-agl*y[2]+f(y[0]);
}

void plot(Vec_DP &x, Mat_DP &y, int n, int m, const char *name)
{
  int i;
  ofstream fp("z1.dat");
  for (i=1;i<n;i++)
  fp<<x[i]<<" "<<y[m][i]<<endl;
  fp.close();
  gnuplt2("z1.dat",name,0,NULL);
}

Vec_DP *xx_p;   // defining declaration
Mat_DP *y_p;

int main(void)
{
  int i,j,ii,yn =1;
  DP x1=12.0,x2=40.0;
  Vec_DP vstart(NVAR);
  DP y1=0.0, y2=1.0, y3= 1.0, tmp;
  const char *name="(y1(x),y3(x))-plane";

  // Note: The arrays xx and y must have indices up to NSTEP
  xx_p=new Vec_DP(NSTEP+1);
  y_p=new Mat_DP(NVAR,NSTEP+1);

  vstart[0]=y1;
  vstart[1]=y2;
  vstart[2]=y3;
  for (ii=1;ii<10;ii++)
  {
```

```
    if (ii>1)
    {
      vstart[0]=rdm(0.8,1.5);
      vstart[1]=rdm(-0.5,0.5);
      vstart[2]=rdm(-0.2,0.5);
    }
    NR::rkdumb(vstart,x1,x2,derivs);
    Vec_DP &xx=*xx_p;
    Mat_DP &y=*y_p;
    printf("%8s %17s %10s  %10s\n","x","y1(x)","y2(x)" ,"y3(x)");
    for (j=10;j<NSTEP;j+=10)
      printf("%10.4f %14.6f %12.6f  %12.6f\n",
        xx[j],y[0][j], y[1][j], y[2][j]);
    for (i=1;i<NSTEP;i++) xx[i]=y[0][i];
    plot(xx,y,NSTEP-1, 2, name);
  }
  return 0;
}
// FILE: myod4.cpp ends
```

16 REUNA-ARVOTEHTÄVÄT

16.0 Johdanto

Perustehtävä: Etsi funktiot y_i s.e $\forall x \in (x_1, x_2)$

$$(1) \qquad \begin{cases} \frac{dy_i(x)}{dx} = g_i(x, y_1, ..., y_N), \ i = 1, ..., N \\ (1a) \ B_{1j}(x_1, y_1, ..., y_N) = 0, \ j = 1, ..., n_1 \\ (1b) \ B_{2j}(x_2, y_1, ..., y_N) = 0, \ j = 1, ..., N - n_1 \end{cases}$$

Ratkaisumenetelmät: a) tähtäysmenetelmä

b) relaksaatiomenetelmä

c) differenssimenetelmä

a) **Tähtäysmenetelmä:** Kiinnitetään kaikkien y_i:iden arvot x_1:ssä se. (1a) toteutuu (n_1 kpl ehtoja). Ratkaistaan diff.yht. näillä alkuarvoilla ja tutkit. ratk. arvoja x_2:ssa, jolloin (1b) ei välttämättä toteudu. Säätämällä $N - n_1$ kpl parametreja pakotetaan myös (1b) voimaan. (Myös void. lähteä liikkeelle molemm. päistä x_1, x_2 ja vaatia, että saadut ratkaisut liittyvät toisiinsa "sileästi"ennalta valitussa liitospisteessä.) Newtonin moniulotteinen juurenhakumenetelmä tulee käyttöön.

b) **Relaksaatiomenetelmä:**

-valitaan jakopisteet

-diff.yht. korvataan jakopisteissä pätevillä differenssiyhtälöillä

-ratkaisuyritteen jakopisteissä annetut arvot ovat tuntemattomia, differenssiyhtälölöiden eikä reunaehtojen tarvitse toteutua

-säädetään ratkaisuyritteen arvoja jakopisteissä niin että differenssiyhtälöt ja reunaehdot lähenevät askel askeleelta haluttuja.

c) **Differenssimenetelmä**

-valitaan jakopisteet

-muodostetaan kuhunkin pisteeseen liittyvä yhtälö huomioiden erityisesti reunaehdot

-ratkaistaan saatu harva lineaarinen yhtälöryhmä

-soveltuu lähinnä lineaariseen tapaukseen

16.1 Tähtäysmenetelmä

16.0 (1):n ratkaisufunktiot $y_i,\ i = 1, ..., N$, toteuttavat n_1 kpl ehtoja x_1:ssä, joten jää $n_2 = N - n_1$ vapaasti valittavaa alkuarvoa x_1:ssä.

Voidaan kirjoittaa

$$y_i(x_1) = y_i(x_1; V_1, ..., V_{n_2})\ i = 1, ..., N.$$

Annetulle $\overline{V} = (V_1, ..., V_{n_2})$ saadaan $\overline{y}(x_1) = (y_1(x_1), ..., y_N(x_1))$, josta edelleen näillä alkuarvoilla saadaan (1):n AAT:n ratkaisu x_2:ssa (integ. x_1:sta x_2:een esim. `odeint`). Määritellään poikkeamavektori $\overline{F} = (F_1, ..., F_{n_2}) = (B_{21}(x_2, \overline{y}), ..., B_{2n_2}(x_2, \overline{y}))$

Siis etsitään $\overline{V}$:n arvoa s.e. $\overline{F} = 0$, joten haluttu $\overline{V}$:n korjaus on $\delta\overline{V}$ (vrt. Newton)

$$[\alpha] \cdot \delta V = -F,\ [\alpha]_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial V_j}$$

ja siis $\overline{V}_{new} = \overline{V}_{old} + \delta\overline{V}$.

Tässä käytetään approksimaatiota

$$\frac{\partial F_i}{\partial V_j} \approx \frac{F_i(V_1, ..., V_j + \triangle V_j, ...) - F_i(V_1, ..., V_j, ..)}{\triangle V_j}$$

Alg. `shoot` s.758

16.2. Tähtäys liitospisteeseen

Jos tähtäysmenetelmässä alkuarvot ovat huonosti valittuja, niin voi olla, ettei vastaava numeerinen ratkaisu ole edes määritelty koko välillä $[x_1, x_2]$. Tällöin voi olla mahdotonta edetä pisteestä x_1 pisteeseen x_2.

Vaikeutta voidaan yrittää torjua valitsemalla jokin liitospiste $x_f \in (x_1, x_2)$ s.e. x_1:stä voidaan edetä x_f:ään ja x_2:sta (toiseen suuntaan) x_f:ään. Pisteessä x_i pätee $n_i,\ i = 1, 2$, ehtoa, joten x_1:stä

aloitettaessa voidaan $N - n_i$ param. valita vapaasti ($N = n_1 + n_2$). Merkitään

$$y_i(x_1) = y_i(x_1; V_{(1)1}, ..., V_{(1)n_2}),\ i = 1, ..., N,$$

$$\overline{y}_i(x_2) = \overline{y}_i(x_2; V_{(2)1}, ...V_{(2)n_1}),\ i = 1, ..., N,$$

missä y_i tot. RAT:n x_2:ssä ja $\overline{y}_i$ x_1:ssa. Yhteensopivuusvaatimus, joka ratkaistaan Newtonin menetelmällä

$$y_i(x_f; V_{(1)}) = \overline{y}_i(x_f; V_{(2)}),\ i = 1, ..., N,$$

Alg. `shootf` s. 761

16.3 Relaaksaatiomenetelmä

Korvataan ODE (ordinary diff.eq) FDE:llä (finite diff.eq.)

(1) $$\text{ODE}: \ \frac{dy}{dx} = g(x, y),$$

(2) $$\text{FDE}: \ y_k - y_{k-1} = (x_k - x_{k-1}) g[\frac{x_k + x_{k-1}}{2}, \frac{y_k + y_{k+1}}{2}].$$

Yleensä N yhtälöä M jakopistettä $\Rightarrow$ $N \times M$ muuttujaa.

Huomaa, että FDE kytkee kaksi vierekkäistä pisteparia nim. (x_{k-1}, y_{k-1}) ja (x_k, y_k).

Etsitään ratkaisua välillä x_1, x_M $x_1 < x_2 < ... < x_M$ N:nnän dy:n reuna-arvot tehtävälle, n_1 ehtoa x_1:ssa, $n_2 = N - n_1$ pist. x_M. Merkitään $\overline{y}_k = (y_1, ..., y_N)|_{x=x_k}$. Tässä tapauksessa kaavan (2) yleistys on seuraava

(3)
$$0 = \overline{E}_k = \overline{y}_k - \overline{y}_{k-1} - (x_k - x_{k-1}) \overline{g}_k(x_k, x_{k-1}\overline{y}_k, \overline{y}_{k-1}),\ k = 2, 3, ..., M.$$

FDE (3) kytkee $2N$ muuttujaa pist. $k-1, k$ ja sen komponentit antavat N yhtälöä. Yhtälöt soveltuvat indeksin arvoilla $k = 2, .., M$,

yhteensä $M-1$ kpl yhtälöryhmiä. Siis yht. $N(M-1)$ yhtälöä MN tuntemattomalle. Puuttuvat N yhtälöä saadaan reunaehdoista.

Pist. x_1 saadaan

$$0 = E_1 = B(x_1, \overline{y}_1). \tag{4}$$

Toisessa päätepisteessä x_M saadaan

$$0 = E_{M+1} = C(x_M, \overline{y}_M). \tag{5}$$

Vektorilla E_1 ja B on vain n_1 vapaasti muuttuvaa komponenttia (reunaehdot x_1:ssä). Oletetaan että ne ovat viimeiset n_1 komponenttia ts. $E_{j,1} \neq 0$ kun $j = n_2 + 1, ..., N$. Toisessa reunapisteessä oletetaan, että vain ensimmäiset n_2 komponenttia $E_{j,M+1}$, $j = 1, .., n_2$, muuttuvat vapaasti.

FDE:n (3)-(5) ratkaisu: muuttujia ovat $y_{j,k}$, jotka ovat N:n muuttujien y_j arvot M pisteissä x_k. Etsitään muuttujaan $y_{j,k}$ liittyvä korjaus $\triangle y_{j,k}$ s.e. $y_{j,k} + \triangle y_{j,k}$ on parannettu ratkaisu.

Korjaustermien tot. yhtälö saadaan Taylor-sarjasta

$$E_k(\overline{y}_k + \triangle\overline{y}_k, \triangle\overline{y}_{k-1} + \triangle\overline{y}_{k-1}) \sim \tag{6}$$

$$E_k(\overline{y}_k, \overline{y}_{k-1}) + \sum_{n=1}^{N} \frac{\partial E_k}{\partial y_{n,k-1}} \triangle y_{n,k-1} + \sum_{n=1}^{N} \frac{\partial E_k}{\partial y_{n,k}} \triangle y_{n,k}.$$

Vaatimus $E(\overline{y} + \Delta\overline{y}) = 0$ johtaa yhtälöihin

$$\sum_{n=1}^{N} S_{j,n} \triangle y_{n,k-1} + \sum_{n=N+1}^{2N} S_{j,n} \triangle y_{n-N,k} = -E_{j,k};\ j = 1, ...N, \tag{7}$$

$$S_{j,n} = \frac{\partial E_{j,k}}{\partial y_{n,k-1}},\ S_{j,n+N} = \frac{\partial E_{j,k}}{\partial y_{n,k}},\ n = 1, ..., N. \tag{8}$$

$[S_{j,n}]$ on $N \times 2N$ matriisi kullakin indeksillä k.

Siis kukin jakopiste antaa N yhtälöryhmän, joka kytkee $2N$ korjaustermiä pisteissä $k, k-1$.

Samoin voidaan tehdä reunapisteissä:

$$\sum_{n=1}^{N} S_{j,n} \nabla y_{n,1} = -E_{j,1}, \ j = n_2 + 1, ..., N, \tag{9}$$

missä

$$S_{j,n} = \frac{\partial E_{j,1}}{\partial y_{n,1}}, \ n = 1, .., N, \tag{10}$$

$$\sum_{n=1}^{N} S_{j,n} \triangle y_{n,M} = -E_{j,M+1}, \ j = 1, ..., n_2, \tag{11}$$

$$S_{j,n} = \frac{\partial E_{j,M+1}}{\partial y_{n,M}} \ n = 1, ..., N. \tag{12}$$

NR:n kuva 17.3.1 s. 765 esittää ko. matriisin rakenteen. Korjaukset saadaan ratkaisemalla ko. yhtälöryhmä. Ratkaisun välivaiheena Gaussin eliminoinnin variantti ks. kirja s. 764, joka käyttää hyväkseen matriisin lohkostruktuuria, "harvuutta", muistintarpeen minimoimiseksi.

16.4 Differenssimenetelmistä

Lineaarisen differentiaaliyhtälön

$$L(y) = y'' + p_1(x)y' + p_2(x) = q(x) \tag{1}$$

reuna-arvotehtävän (RAT)

$$\begin{cases} L(y) = q(x) \\ \alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) = A \\ \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) = B \end{cases} \tag{2}$$

ratkaisemiseksi voidaan käyttää ns. *differenssimenetelmää.*

Derivaatat korvataan tässä approksimaatioilla

$$y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h},\ h > 0, \tag{3}$$

$$y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2},\ h > 0. \tag{4}$$

Differenssiyhtälöiden käyttöä RAT:n 16.4 (2) ratkaisuun esitellään Luvussa 20. Pääpiirteisssään menetelmä on seuraava:

1) **Diskretointi** $x_i = x_0 + ih, x_0 = a,\ h = \frac{b-a}{N},\ i = 0, 1, ..., N,\ y_i = y(x_i)$. (3)&(4) $\Rightarrow$

$$y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} + p_1(x_i)(y_{i+1} - y_{i-1})\frac{h}{2} + p_2(x_i)y_i h^2 = h^2 q(x_i) \tag{5}$$

2) **Lineaaristen yhtälöiden muodostus** muuttujille $y_0, y_1, ..., y_N$. Huomioidaan reuna-arvot. Saadaan muotoa

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 & \cdots & 0 & \\ b_2 & a_2 & c_2 & \cdots & \\ \vdots & & & & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & & b_{n-1} & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix}$$

oleva lineaarinen yhtälöryhmä, jossa $n = N + 1,\ z_i = y_{i-1},\ i = 1, ..., n$ ja $w_i,\ i = 1, ..., n$ määräytyy kaavoista (5) ja RAT:stä (2).

3. Lin. yhtälöiden ratkaisu

Yo. yhtälöryhmä on tridiagonaalinen, joten se voidaan ratkaista käyttäen alg. `tridag` .

17 DIFFERENSSIMENETELMISTÄ

17.0 Johdanto

Differentiaaliyhtälöiden numeeriseen käsittelyyn on kehitetty ns. *differenssimenetelmä,* joka perustuu määrittelyalueen tasaväliseen diskretointiin ja derivaattojen approksimointiin erotusosamäärillä. Tarkastelemme jatkossa vain 1- tai 2-ulotteisia tilanteita. Jälkimmäisessä tapauksessa diskretointi tapahtuu koordinaattiakselien suuntaisilla suorakulmioilla ja oletamme että määrittelyalue on monikulmio, jonka sivut ovat koordinaattiakselien suuntaisia. Jos suorakulmiot ovat neliöitä, voidaan sallia myös sivuja, joiden päätepisteet ovat neliöiden kärkipisteitä, ja jotka muodostavat 45^o kulman koordinaattiakselien suuntien kanssa.

Taylorin kaavasta saadaan yhden muuttujan funktiolle y:

$$y(x+h) = y(x) + hy'(x) + \frac{1}{2}h^2y''(x) + ...$$

$$y(x-h) = y(x) - hy'(x) + \frac{1}{2}h^2y''(x) - ...$$

$$y(x+h) + y(x-h) = 2y(x) + h^2y''(x) + O(h^3)$$

$$\Rightarrow \; y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x-h)}{2h} + O(h^2), \tag{17.1}$$

$$\Rightarrow \; y'(x) = \frac{y(x+h) - y(x)}{h} + O(h^2), \tag{17.2}$$

$$\Rightarrow \; y''(x) = \frac{y(x+h) - 2y(x) + y(x-h)}{h^2} + O(h^3). \tag{17.3}$$

Oletamme nyt, että u on kahden muuttujan funktio ja jaamme tason yhteneviin suorakulmioihin, kärkipisteinä (x_i, y_j), missä $x_i =$

$ih, y_j = jk, i, j = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ...$ ja $h(k)$ on suorakulmion leveys (korkeus). Merkitsemme vielä

$$u_{i,j} = u(x_i, y_j). \tag{17.4}$$

Ylläolevien yhden muuttujan tapausta koskevien tarkastelujen nojalla saadaan

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i+1,j} - 2u_{i,j} + u_{i-1,j}}{h^2}, \tag{17.5}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial y^2}(x_i, y_j) \approx \frac{u_{i,j+1} - 2u_{i,j} + u_{i,j-1}}{k^2}. \tag{17.6}$$

Näiden kaavojen soveltaminen kahden muuttujan differentiaaliyhtälön numeeriseen ratkaisuun reuna-arvotehtävien tapauksessa etenee periaatteessa seuraavasti.

1) Numeroimme alueen sisällä olevat verkkopisteet (x_i, y_j) yhdellä indeksillä $r = 1, ..., m$. Tuntemattomista $u_{i,j}$ muodostuu nyt vektori $p = (p_1, ..., p_m)$. Tavallisesti käytämme jatkossa $u_{i,j}$:lle verkkopisteen mukaista indeksiä r. Alueen reunalla olevissa verkkopisteissä etsittävän ratkaisun arvot saadaan reuna-arvotehtävästä.

2) Muodostamme m kpl yhtälöitä, yhden kussakin pisteessä (x_i, y_j), kaavojen (17.5) ja (17.6) mukaisesti. Pisteessä (x_i, y_j) saadaan yhtälö, jossa esiintyvät tuntemattomat $u_{i,j}, u_{i\pm1,j}, u_{i,j\pm1}$, tai reuna-arvot jos jokin naapuripisteistä $u_{i\pm1,j}, u_{i,j\pm1}$ sattuu olemaan reunapiste.

3) Ratkaistaan saatu yhtälöryhmä. Tarkastellemme jatkossa vain tilanteita, joissa ryhmä on lineaarinen. Silloin ratkaisu voidaan tehdä esim. Gaussin eliminoinnin tai LU-hajoitelman avulla.

On selvää, että ratkaisun tarkkuus riippuu diskretoinnin parametreistä h ja k. Ei kuitenkaan ole mitenkään itsestään selvää, että virhe $\to 0$ kun $h, k \to 0$. Virhearvioita on voitu johtaa eräissä erikoistapauksissa. Ne sisältävät riippuvuuden mm. tarkasteltavasta yhtälöstä, ratkaisufunktioiden 4. kertaluvun osittaisderivaatoista ja luvuista h ja k.

Jatkossa sovellamme yo. diskretointimenettelyä tavallisen diff.-yhtälön reuna-arvotehtävän ratkaisuun:

$$D(y) = 0; y(0) = a, y(1) = b,$$

missä $D(y) = 0$ on differentiaaliyhtälö (esim. toisen kertaluvun vakiokertoiminen diff. yhtälö) tai osittaisdifferentiaaliyhtälön reunaarvotehtävän ratkaisuun tason monikulmiossa.

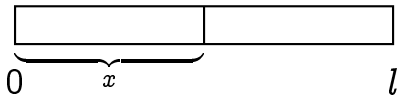
Tärkeitä "prototyyppejä"osittaisdifferentiaaliyhtälöistä ovat ($u : D \to R$)

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \alpha^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \textit{lämpöyhtälö} \tag{1}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = c^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \textit{aaltoyhtälö} \tag{2}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0 \quad \textit{Laplacen yhtälö} \tag{3}$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = p(x, y);\ u \,|\, \partial D = g \quad \textit{Poissonin yhtälö} \tag{4}$$



(1):n ratkaisu $u(x, t)$ kuvaa (esim.) lämpötilaa homogeenisen sauvan kohdassa x, ajanhetkellä t, $0 < x < l$, α^2 kerroin.

(2) esiintyy akustisten, vesi–, ja sähkömagneettisten aaltojen tutkimuksessa (myös värähtelevä kieli).

(3) esiintyy sähkö– ja magneettikenttien potentiaalien tutkimuksessa $\to$ toinen nimitys *potentiaaliyhtälö*.

(4) esiintyy mm. nestedynamiikassa.

Kuten tavallisten DY:den tapauksessa ODY:den (1)–(4) ratkaisut eivät yleensä ole yksikäsitteisiä. Tarvittaessa yhtälöihin (1)–(4) liitetään erilaisia täydentäviä ehtoja (esim. reunaehtoja) jotka takaavat ratkaisujen yksikäsitteisyyden.

Yhtälön (1) tapauksessa reunaehdot voivat esim. olla (i) lämpötilajakauma hetkellä $t = 0$ ts. $u(x, 0) = f(x)$ ja lisäksi (ii) $u(0, t) = u(l, t) = 0 \quad \forall\ t \geq 0$ tai $u_x(0, t) = u_x(l, t) = 0$.

Yhtälön (2) tapauksessa reunaehto voi olla, kun tarkastellaan värähtelevää kieltä, (i) kielen asema kun $t = 0$ (ii) kielen nopeus hetkellä $t = 0$ (iii) päätepisteet paikallaan. Ts. $u(x,0) = f(x)$, $u_t(x,0) = g(x)$, $u(0,t) = u(l,t) = 0$.

Yhtälön (3) tapauksessa ei ole aikaparametria t. Luonnollinen lisäehto (3):een on esim. se että annetaan u:n arvot alueen reunalla. Näin täydennetty (3) on kuuluisa "Dirichletin probleema". Yhtälön (3) ratkaisuja sanotaan harmonisiksi funktioiksi. Esimerkkejä harmonisista funktioista ovat muotoa $x^2 + Axy - y^2 + Bx + Cy$, missä A, B, C, ovat vakioita, olevat funktiot.

Ratkaisun yksikäsitteisyys/olemassaolo voi olla selvää esim. fysikaalisin perustein. Jatkossa oletamme että näin on asianlaita.

ODY–teorian klassisena lähtökohtana on luokittelu yhtälöiden (1)–(3) mukaisiin prototyyppeihin ja kunkin luokan ominaispiirteiden selvittely. Täsmällisemmin ODY

$$A\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + B\frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C\frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = f(x, y, \frac{\partial u}{\partial x}, \frac{\partial u}{\partial y}, u)$$

on *elliptinen parabolinen* t. *hyperbolinen* sen mukaan onko $B^2 - 4AC < 0, = 0, > 0$. Tämä kolmijako muodostaa toisen kertaluvun ODY–teorian perustan.

17.1. Tavallisen diff. yhtälön reuna-arvotehtävä

Lineaarisen differentiaaliyhtälön

$$L(y) = y'' + p_1(x)y' + p_2(x)y = q(x) \tag{1}$$

reuna-arvotehtävän (RAT)

$$\begin{cases} L(y) = q(x) \\ \alpha_1 y(a) + \alpha_2 y'(a) = A \\ \beta_1 y(b) + \beta_2 y'(b) = B \end{cases} \tag{2}$$

ratkaisemiseksi voidaan käyttää ns. *differenssi-menetelmää.*

Derivaatat korvataan tässä approksimaatioilla (17.1) ja (17.3).

Differenssi-menetelmä lineaarisen differentiaaliyhtälön (1) RAT:n $y(a) = A, y(b) = B$ ratkaisemiseksi on seuraava:

1) **Diskretointi.** $x_i = x_0 + ih, x_0 = a,\ h = \frac{b-a}{N},\ i = 0, 1, ..., N,\ y_i = y(x_i)$. (17.1)&(17.3) $\Rightarrow$

$$(3)\quad y_{i+1} - 2y_i + y_{i-1} + p_1(x_i)(y_{i+1} - y_{i-1})\frac{h}{2} + p_2(x_i)y_i h^2 = h^2 q(x_i)$$

(4)

$$y_{j-1}(1 - p_1(x_j)\frac{h}{2}) + y_j(-2 + p_2(x_j)h^2) + y_{j+1}(1 + p_1(x_j)\frac{h}{2}) = h^2 q(x_j),$$
$$j = 1, ..., N-1.$$

Ensimmäisessä yhtälössä $y_0(1 - p_1(x_1)\frac{h}{2})$ ja viimeisessä yhtälössä $y_N(1 - p_1(x_{N-1})\frac{h}{2})$ ovat vakioita, jotka määräytyvät reuna-arvoista ja ne siirretään oikealle puolelle.

2) **Lineaaristen yhtälöiden muodostus.** Tuntemattomia ovat $y_1, ..., y_{N-1}$. Huomioidaan reuna-arvot. Saadaan muotoa

$$\begin{bmatrix} a_1 & c_1 & \cdots & 0 & \\ b_2 & a_2 & c_2 & \cdots & \\ \vdots & & & & c_{n-1} \\ 0 & \cdots & & b_n & a_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} z_1 \\ \\ \vdots \\ z_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} w_1 \\ \\ \vdots \\ w_n \end{bmatrix}$$

oleva lin.yht. ryhmä, jossa $n = N - 1$, $z_i = y_i,\ i = 1, ..., n$ ja $w_i,\ i = 1, ..., n$ määräytyy kaavoista (3) ja RAT:stä.

3. Lin. yhtälöiden ratkaisu

Yo. yhtälöryhmä on tridiagonaalinen, joten se voidaan ratkaista käyttäen algoritmia `tridag`.

Esimerkki.

Ratkaise reuna-arvotehtävä $y'' = x + (1 - x/5)y$, $y(1) = 2, y(3) = -1$, diskretoinnilla

$$y"(x) = (y(x-h) + y(x+h) - 2y(x))/(h * h), h = 2/10.$$

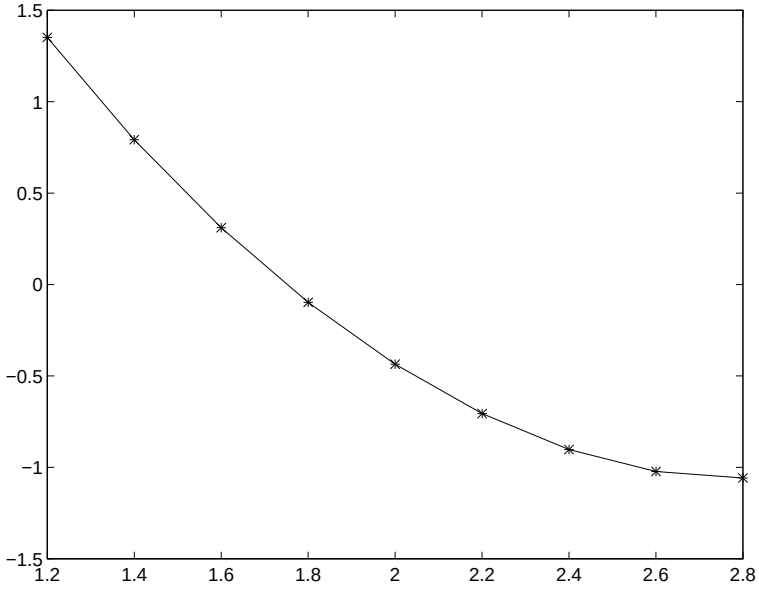
Ratkaisu tehdään seuraavalla algoritmilla.

```
// FILE: mybvp2.cpp begins
/*  g++ mybvp2.cpp -L../lib -I../utils -o a  -lm -lnr      */
//   Diagonal entries a[1]..a[N]
//   superdiagonal entries c[1]..c[N-1]
//   subdiagonal entries b[2]..b[N]
/* Solve BVP
    y(a) = y0, y(b) = y1
    y" + p1(x)y' +p2(y)y = q(x)
    at points x_j =a+j h ; h =(b-a)/n, j =1,...,n-1 */

#include <iostream>
#include <iomanip>
#include "nr.h"

using namespace std;

#define NP 10

DP p1(DP x)
{
  return 0.0;
}
DP p2(DP x)
{
  return -1.0+(x/5.0);
}
DP q(DP x)
{
  return x;
}

int main()
{
  int k,n=NP;
  Vec_DP diag(NP-1),superd(NP-1),subd(NP-1),rhs(NP-1), u(NP-1);
  DP a,b, h, x, y0, y1;
  a=1.0; b=3.0; h=(b-a)/(DP)n;
  y0 =2.0;     y1=-1.0;
  x=a+h;
  for (k=0;k<n-2;k++)
  {
    diag[k]=-2.0+h*h*p2(x);
    superd[k]=1.0+p1(x)*h/2.0;
    subd[k+1]=1.0-p1(x)*h/2.0;
    rhs[k]=h*h*q(x);
```

```
    x=x+h;
  }
  diag[n-2]=-2.0+h*h*p2(b-h);
  rhs[0]=rhs[0]-y0*(1.0-p1(a+h)*h/2.0);
  rhs[n-2]=rhs[n-2]-y1*(1.0+p1(b-h)*h/2.0);
  subd[0]=0.0;
  NR::tridag(subd,diag,superd,rhs,u);

  cout<<"\nThe solution vector is:\n";
  cout<<setw(16)<<"x"<<setw(16)<<"u(x)"<<endl;
  for (k=0;k<n-1;k++)
    cout<<setw(16)<<a+(k+1.0)*h<<setw(16)<<u[k]<<endl;
  return 0;
}
// FILE: mybvp2.cpp ends
```

Tulokseksi saadaan:

```
The solution vector is:
               x            u(x)
             1.2         1.35909
             1.4        0.807501
             1.6        0.335166
             1.8      -0.0640526
               2       -0.392911
             2.2       -0.651199
             2.4       -0.836074
             2.6        -0.94234
             2.8       -0.962698
```



17.2. Osittaisdifferentiaaliyhtälöiden reuna-arvotehtävät

Differenssimenetelmä soveltuu myös osittaisdifferentiaaliyhtälöiden numeeriseen ratkaisuun monikulmioalueissa. Edellä kohdassa 17.1 tavallisen differentiaaliyhtälön reuna-arvotehtävä palautettiin tridiagonaalisen lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisuun. Osittaisdifferentiaaliyhtälöiden tapauksessa ratkaisu palautuu vastaavien välivaiheiden jälkeen sellaisen harvan lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisuun, missä $\neq 0$ alkioita on vain diagonaalilla ja eräillä sivudiagonaaleilla.

Laplace–yhtälön numeerinen ratkaisu. Laplace–yhtälön

$$\nabla^2 u = u_{xx} + u_{yy} = 0$$

diskretointiin käytämme approksimointia

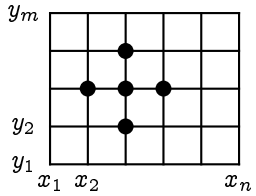
$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

joten

$$\nabla^2 u(x,y) =$$

$$\frac{u(x+h,y) + u(x-h,y) + u(x,y+h) + u(x,y-h) - 4u(x,y)}{h^2} + O(h^2). \tag{1}$$

Jaetaan suorakulmio $R = \{(x,y) : 0 \le x \le a,\ 0 \le y \le b,\ b/a = m/n\}$ $(n-1)\times(m-1)$ neliöön sivunpituus $= h$ $(a = nh, b = mh)$.



Merkitään

$$x_i = (i-1)h,\ i = 1, \ldots y_j = (j-1)h,\ j = 1, \ldots$$

(1)$\Rightarrow$

$$(2) \qquad \nabla^2 u_{i,j} = \frac{u_{i+1,j} + u_{i-1,j} + u_{i,j+1} + u_{i,j-1} - 4u_{i,j}}{h^2} = 0.$$

(2) on nimeltään *viiden pisteen differenssikaava* Laplace-yhtälölle. Kaava ilmaisee eräänlaisen keskiarvo-ominaisuuden arvoille $u_{i,j}$. Tämä on diskreetti analogia harmonisten funktioiden tunnetulle keskiarvo-ominaisuudelle.

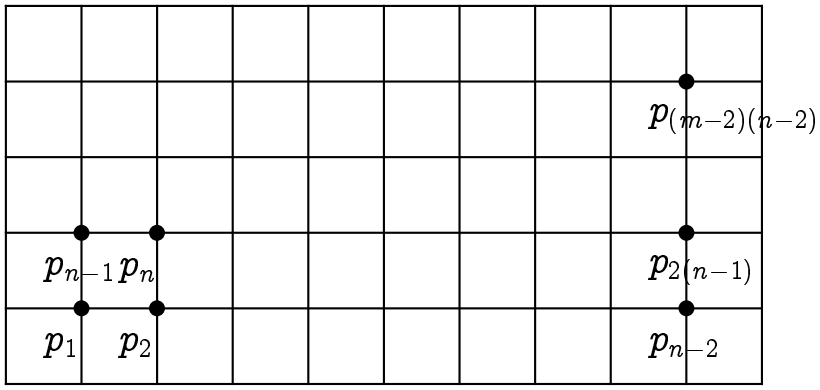
Oletamme, että arvot $u_{i,j}$ tunnetaan reunalla (kun $i = 1$ tai $n+1$, $j = 1$ tai $m+1$), kuten on laita esim. Dirichletin ongelmassa.

Verkon sisäpisteitä $(2 \le i \le n-1,\ 2 \le j \le m-1)$ on $(n-2) \times (m-2)$ kpl ja tuntemattomia $u_{i,j}$ samoin.

Muodostetaan tuntemattomista vektori

$$p = (p_1, \ldots, p_{n-1}, p_{n-1}, \ldots, p_{(n-2)\times(m-2)})$$

seuraavasti

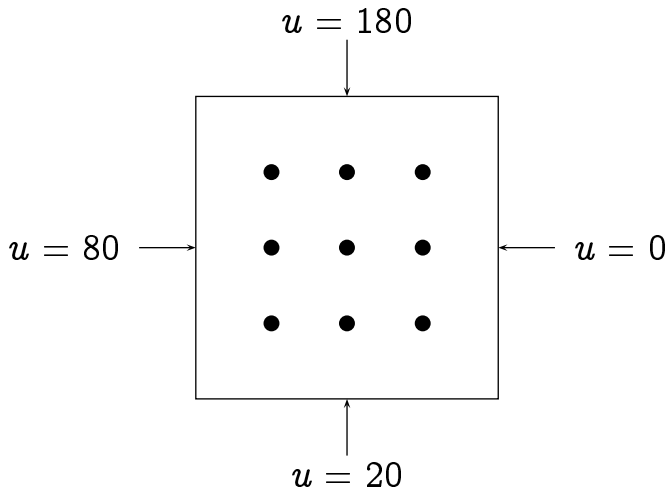


Yhtälöt kirjoitetaan p_i:lle indeksin i mukaisessa järjestyksessä käyttäen kaavaa (2) ja huomioiden reuna–arvot.

Esimerkki. Etsi Dirichletin probleeman $\nabla^2 u = 0$,

$$\begin{cases} u(x,0) = 20,\ u(x,4) = 180,\ 0 < x < 4, \\ u(0,y) = 80,\ u(4,y) = 0,\ 0 < y < 4, \end{cases}$$

ratkaisu alueen $R = \{(x,y) : 0 \le x \le 4,\ 0 \le y \le 4\}$ pisteissä (i,j), $i = 1,2,3$, $j = 1,2,3 (h = 1)$.



Tuntemattomien indeksointi on seuraavan taulukon mukainen:

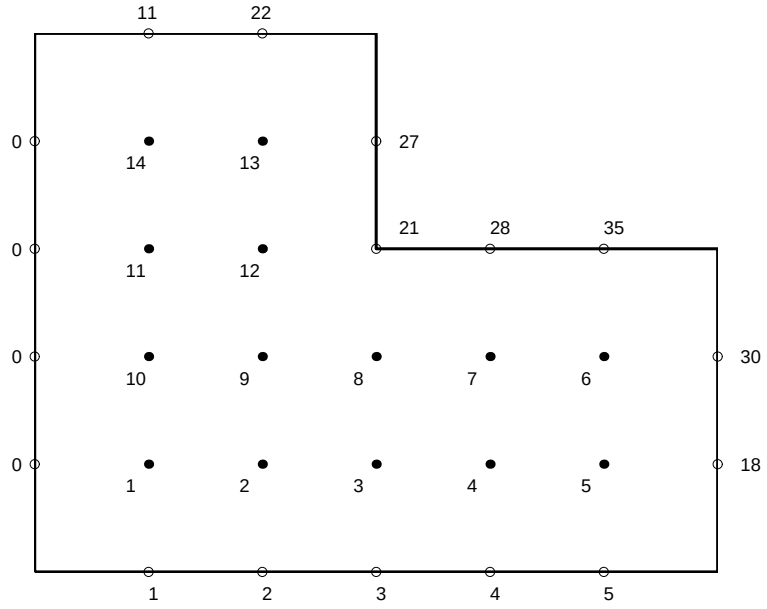
```
7 8 9
4 5 6
1 2 3
```

1. yhtälö on $80 + p_2 + 20 + p_4 - 4p_1 = 0$

2. yhtälö on $p_1 + p_3 + 20 + p_5 - 4p_2 = 0$
Saadaan yhtälöryhmä (Mathews s. 524)

$$
\begin{array}{rrrrrrrrrr}
-4p_1 + & p_2 & + & p_4 & & & & & = & -100 \\
p_1 - 4p_2 + & p_3 & + & p_5 & & & & & = & -20 \\
p_2 - 4p_3 & & & + & p_6 & & & & = & -20 \\
p_1 & & - 4p_4 + & p_5 & & + & p_7 & & = & -80 \\
p_2 & & + & p_4 - 4p_5 + & p_6 & & + & p_8 & = & 0 \\
& p_3 & & + & p_5 - 4p_6 & & & + & p_9 = & 0 \\
& & p_4 & & & - 4p_7 + & p_8 & & = & -260 \\
& & & p_5 & & + & p_7 - 4p_8 + & p_9 = & -180 \\
& & & & + & p_6 & & + & p_8 - 4p_9 = & -180
\end{array}
$$

Esimerkki. Seuraava ohjelma ratkaisee kuvanmukaisen Dirichletin ongelman. Ongelmassa on valmiiksi muodostettu diskretointi, tuntemattomien numerointi alueen sisäpisteissä ja annettu reuna-arvot reunalla olevissa verkon kulmapisteissä.



Ratkaisussa voidaan erottaa seuraavat vaiheet.
(1) Alueen ja reuna-arvojen kuvailu jatkoon sopivassa muodossa.

(2) Verkkopisteiden numerointi ja yhtälöiden muodostus.

(3) Syötetiedoston muodostus. Jos on m kpl yhtälöitä, niin muodostetaan $m \times 6$ matriisi, jonka 1 sarake on rivin indeksi, sarakkeet 2-5 ovat 4:n lähimmän naapuripisteen indeksit jos naapuripisteitä puuttuu, niin viimeistä indeksiä toistetaan niin, että saadaan 4 indeksiä ja 6 sarake on naapuripisteiden joukossa mahdollisesti olevien reuna-arvojen summa. Kuvan tapauksessa syötetiedosto `mylu2.inp` on

```
14 6
1 2 10 10 10 1
2 1 3 9 9 2
3 2 4 8 8 3
4 3 5 7 7 4
5 4 6 6 6 23
6 5 7 7 7 65
7 4 6 8 8 28
8 3 7 9 9 21
9 2 8 10 12 0
10 1 9 11 11 0
11 10 12 14 14 0
12 9 11 13 13 21
13 12 14 14 14 49
14 11 13 13 13 11
```

(4) Ratkaistaan yhtälöryhmä ja tulostetaan ratkaisu.

```
// FILE: mylu2.cpp
/*  g++ mylu2.cpp -I../utils -I../democpp02 -L../lib -o a -lm -lnr */

#include <cstdlib> // Used in putmat2
#include <cstdio>  // Used in putmat2
#include  <ctime>
#include <string>
#include <fstream>
#include <iostream>
#include <iomanip>
#include <cstdarg>
#include "nr.h"
#include "matutl02.cpp"
#include "solve.cpp"
#include <cmath>
```

```
#define NP 14

using namespace std;

void showintmat(Mat_DP &a)
{
  int i,j;
  for (i=0;i<a.nrows();i++)
  {
    for (j=0;j<a.ncols();j++)
      cout<<setw(4)<<floor(a[i][j]);
    cout<< endl;
  }
}

int main(int argc, char *argv[])
{
   int j,p,k;
   Mat_DP struc;
   const char *fnamea="mylu2.inp";
   if ( argc >= 2) {
     fnamea = argv[1];
   }
   struc = getmat(fnamea);
   Mat_DP a(struc.nrows(),struc.nrows());
   unitmat(a);
   Vec_DP b(struc.nrows()), x(struc.nrows());
   if (struc.nrows() > NP) cout<<"Dimension error in matrix \n";
   for (j=0;j<a.nrows();j++) a[j][j]=-4.0*a[j][j];
   for (j=0;j<a.nrows();j++)
   {
     b[j]=-struc[j][struc.ncols()-1];
     for (p=1; p<struc.ncols()-1;p++)
     {
       k =(int) floor(struc[j][p]);
       if (j!=k-1) a[j][k-1]= 1.0;
     }
   }
   showintmat(a);
   for (p=0;p<struc.nrows();p++) cout<<"  "<<b[p]<<endl;
   for (p=0;p<struc.nrows();p++) x[p] =0.0;
   LUsolve(a,b,x);
   cout<<"\nLU-solution: \n";
   for (j=0;j<a.nrows();j++)
```

```
     cout<<" x["<<j<<"] = "<<x[j]<<endl;
   return 0;
}
// FILE: mylu2.cpp
```

```
/* mylu2.inp :


14 6
1 2 10 10 10 1
2 1 3 9 9 2
3 2 4 8 8 3
4 3 5 7 7 4
5 4 6 6 6 23
6 5 7 7 7 65
7 4 6 8 8 28
8 3 7 9 9 21
9 2 8 10 12 0
10 1 9 11 11 0
11 10 12 14 14 0
12 9 11 13 13 21
13 12 14 14 14 49
14 11 13 13 13 11
*/
```

Käännetyn ohjelman ajo voidaan tehdä esim. komennolla

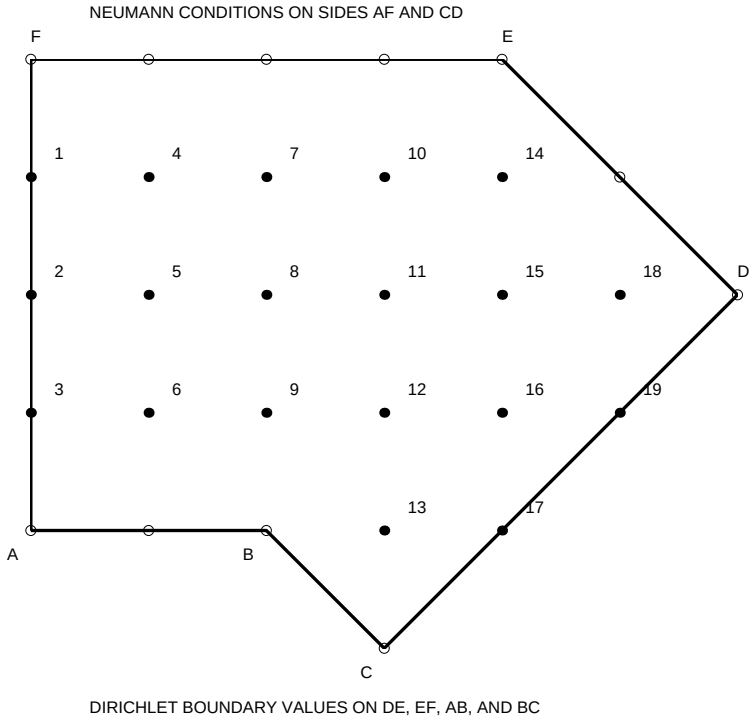
`mylu2 mylu2.inp > mylu2.dat` jolloin ohjelma lukee tiedostosta `mylu2.inp` syötteet ja kirjoittaa tulokset tiedostoon `mylu2.dat`. Alla tiedosto `mylu2.dat`.

```
-4   1   0   0   0   0   0   0   0   1   0   0   0   0
 1  -4   1   0   0   0   0   0   1   0   0   0   0   0
 0   1  -4   1   0   0   0   1   0   0   0   0   0   0
 0   0   1  -4   1   0   1   0   0   0   0   0   0   0
 0   0   0   1  -4   1   0   0   0   0   0   0   0   0
 0   0   0   0   1  -4   1   0   0   0   0   0   0   0
 0   0   0   1   0   1  -4   1   0   0   0   0   0   0
 0   0   1   0   0   0   1  -4   1   0   0   0   0   0
 0   1   0   0   0   0   0   1  -4   1   0   1   0   0
 1   0   0   0   0   0   0   0   1  -4   1   0   0   0
 0   0   0   0   0   0   0   0   0   1  -4   1   0   1
 0   0   0   0   0   0   0   0   1   0   1  -4   1   0
 0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   1  -4   1
 0   0   0   0   0   0   0   0   0   0   1   0   1  -4
-1
-2
-3
-4
-23
-65
-28
-21
-0
-0
-0
-21
-49
-11


LU-solution:
 x[0] = 3
 x[1] = 6
 x[2] = 9
 x[3] = 12
 x[4] = 15
 x[5] = 25
 x[6] = 20
 x[7] = 15
 x[8] = 10
 x[9] = 5
 x[10] = 7
 x[11] = 14
 x[12] = 18
 x[13] = 9
```

Esimerkki. Tarkastamme seuraavaksi monikulmiota G jonka kärkipisteinä ovat ABCDEF, ja G:ssä Poissonin yhtälöä Neumannin-Dirichletin reuna-arvoin

$$\begin{cases} u_{xx}(x,y) + u_{yy}(x,y) = g(x,y), \quad (x,y) \in G, \\ u(x,y) = f(x,y), \quad (x,y) \text{ sivuilla AB, BC tai DE, EF}, \\ \frac{\partial u}{\partial n}(x,y) = 0, \text{ kun (x,y) sivuillaAF tai CD}. \end{cases}$$

Jälkimmäinen, reunan normaaliderivaattaehto, on nimeltään Neumannin ehto. Ruudun sivunpituus on $h = 1/4$. Tuntemattomia on nyt kahta eri tyyppiä, nimittäin sellaisia, jotka vastaavat alueen pisteitä (muut kuin indeksejä $1, 2, 3, 17, 19$ vastaavat) ja alueen reunalla olevia pisteitä (indeksit $1, 2, 3, 17, 19$).



Tarkastamme aluksi ensimm. tyypiä olevia pisteitä $P(x_i, y_j)$. Näihin pisteisiin liittyvä diskretointi antaa yhtälön

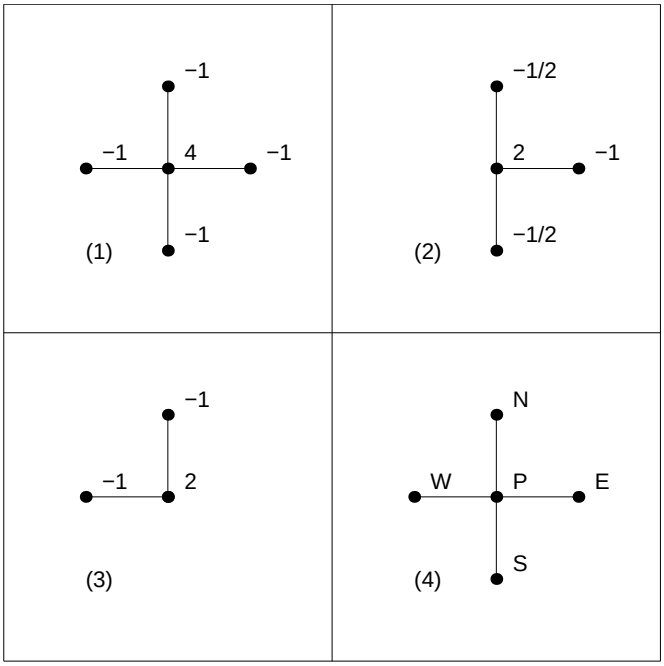
$$\frac{u_E - 2u_P + u_W}{h^2} + \frac{u_N - 2u_P + u_S}{h^2} = g_P \equiv g(x_i, y_j),$$

josta edelleen saadaan

$$4u_P - u_N - u_W - u_S - u_E + h^2 g_P = 0. \tag{1}$$

Ilmansuuntien mukainen indeksointi ilmenee oheisen kuvan kohdasta (4) ja niihin liittyvät painot kohdasta (1).

(1): INTERIOR POINT (2): NEUMANN BRY CONDITION (VERTICAL SIDE)



(3): NEUMANN BRY CONDITION (45 DEGREE)

Seuraavaksi tarkastamme pystysuoralla päätysivulla olevia pisteitä 1, 2, 3, joissa vaaditaan Neumannin reunaehto. Jos P on tällainen piste, kuvitellaan P:n länsipuolelle symmetrinen apupiste, ja ehto

$$\frac{\partial u}{\partial n} \approx \frac{u_W - u_E}{2h} = 0$$

antaa $u_E = u_W$. Huomioimalla tämä kaavassa (1) saadaan

$$4u_P - u_N - 2u_W - u_S + h^2 g_P = 0,$$

$$2u_P - \frac{1}{2}u_N - u_W - \frac{1}{2}u_S + \frac{1}{2}h^2 g_P = 0. \tag{2}$$

Pystysuoran sivun Neumann-reunaehdon diskretointiin liittyvät painot ilmenevät kuvan kohdasta (2).

Jäljellä on vielä 45^o kulmassa oleva päätysivu CD, ja siellä olevat pisteet $17, 19$ joissa myöskin vaaditaan Neumannin ehto. Jos P on tällainen piste, niin oletamme kuten edellä, symmetriasyistä, että $u_E = u_W, u_S = u_N$, jolloin (1) yksinkertaistuu muotoon

$$4u_P - 2u_N - 2u_W + h^2 g_P = 0,$$

ja edelleen muotoon

$$2u_P - u_N - u_W + \frac{1}{2}h^2 g_P = 0, \tag{3}$$

45^o kaltevuuskulmassa olevan sivun Neumann-reunaehdon diskretointiin liittyvät painot ilmenevät kuvan kohdasta (3).

Tuntemattomiin $1, 2, 3$ liittyvät tyyppiä (2) ovat yhtälöt, tuntemattomiin $4, .., 16$ ja 18 tyyppiä (1), ja tuntemattomiin $17, 19$ tyyppiä (3) olevat yhtälöt.

Ratkaisuvaiheessa kirjoitetaan yhtälöryhmä muotoon $Ax = b$ ja ratkaistaan se esim. LU-menetelmällä.

Alla esitämme miten ratkaisu tehdään erikoistapauksessa $h = 1, g(x, y) \equiv 0, f(x, y) = 0$, kun $(x, y) \in DE, EF$ $f(x, y) = 1$, kun $(x, y) \in AB, BC$.

Syötetiedosto tehdään samaan tyyliin kuin ohjelmassa `mylu2.c`. Kun tiedosto on luettu sisään, luettuun matriisiin tehdään korjauksia, jotka aiheutuvat Neumannin reuna-arvoja vastaavien yhtälöiden korjaamisesta.

```
FILE: myneum.inp begins
19 6
1 4 2 2 2 0
2 5 3 3 3 0
3 2 6 6 6 0
4 1 5 7 7 0
5 2 4 6 8 0
6 3 5 9 9 1
7 4 8 8 10 0
8 5 7 9 11 0
9 6 8 12 12 1
```

```
10 7 11 14 14 0
11 10 8 15 12 0
12 9 11 13 16 0
13 12 17 17 17 1
14 10 15 15 15 0
15 11 14 16 18 0
16 12 15 17 19 0
17 13 16 16 16 0
18 15 19 19 19 0
19 16 18 18 18 0

FILE: myneum.inp ends

// FILE: myneum.cpp begins
/* Solve u_{xx}+u_{yy} =0 in G
   where G is bounded by polygonal domain ABCDEF,
   Dirichlet coundition 0 on DE and EF
   Dirichlet coundition 1 on AB and BC
   Neumann condition on AF and CD.
   FILE: myneum.inp gives input assuming h =1
*/
#include<iostream>
#include<iomanip>
#include<cmath>
#include<cstdio>
#include "nr.h"
#include "matutl02.h"
#include "solve.h"

void showmymat(Mat_DP &a,Vec_DP &b)
{
  int i,j;
  for (i=0;i<a.nrows();i++)
  {
    for (j=0;j<a.ncols();j++)
    {
      if ((j==0) && (i != 1)) cout<<"  ";
      if ((j==0) && (i == 1)) cout<<" ";
      if ((i>2) && (j == 2)) cout<<" ";
      if ( fabs(a[i][j] +4.0) <1e-10)
        printf("%- 3d", (int) floor(a[i][j] + 1e-10));
      else if ( fabs(a[i][j] -1.0) <1e-10)
        printf("%- 3d", (int) floor(a[i][j] + 1e-10));
      else if ( fabs(a[i][j] +2.0) <1e-10)
        printf("%- 3d", (int) floor(a[i][j] + 1e-10));
```

```
      else if ( fabs(a[i][j] -0.5) <1e-10) cout<<"1/2 ";
      else if ( fabs(a[i][j] ) <1e-10)
        printf("%- 3d", (int) floor(a[i][j] + 1e-10));
      if (j==a.ncols()-1) cout<<setw(6)<< b[i];
    }
    cout << endl;
  }
}

int main()
{
   int j, p, k;
   Mat_DP struc;
   const char *fnamea="myneum.inp";
   struc = getmat(fnamea);
   Mat_DP a(struc.nrows(),struc.nrows());
   unitmat(a);
   Vec_DP b(struc.nrows()), x(struc.nrows());
   a=-4.0*a;
   for (j=0;j<struc.nrows();j++)
   {
     b[j]=-struc[j][struc.ncols()-1];
     for (p=1; p<struc.ncols()-1;p++)
     {
        k =(int) floor(struc[j][p]);
        if (j!=k-1) a[j][k-1]= 1.0;
     }
   }     // Set a[j][k] =1,k not j,
         // if x_k occurs on j:th row
   // Vertical side Neumann: AF
   for (j=0;j<3;j++)
     for (p=0;p<19;p++) a[j][p]=0.0;
   a[0][0]=-2.0;  a[0][3]=1.0; a[0][1]=0.5; b[0]=-0.5*0;
   a[1][1]=-2.0;  a[1][0]=0.5; a[1][2]=0.5; a[1][4]=1.0; b[1]=-0.5*0;
   a[2][2]=-2.0;  a[2][1]=0.5; a[2][5]=1.0; b[2]=-0.5*1.0;
   // 45 degree side Neumann: CD
   for (p=0;p<19;p++) a[16][p]=0.0;
     for (p=0;p<19;p++) a[18][p]=0.0;
   a[16][16]=-2.0; a[16][12]=1.0; a[16][15]=1.0; b[16]=0.0;
   a[18][18]=-2.0; a[18][15]=1.0; a[18][17]=1.0; b[18]=0.0;
   showmymat(a, b);
   for (p=0;p<struc.nrows();p++) x[p] =0.0;
   LUsolve(a,b,x);
   cout<<"\nLU-solution: "<<endl;
   for (j=0;j<struc.nrows();j++)
```

```
     cout<<" x["<<j<<"] = "<<x[j]<<endl;
   return 0;
}
// FILE: myneum.c ends

/* myneum.inp:

19 6
1 4 2 2 2 0
2 1 5 3 3 0
3 2 6 6 6 0
4 1 5 7 7 0
5 2 4 6 8 0
6 3 5 9 9 1
7 4 8 8 10 0
8 5 7 9 11 0
9 6 8 12 12 1
10 7 11 14 14 0
11 10 8 15 12 0
12 9 11 13 16 0
13 12 17 17 17 1
14 10 15 15 15 0
15 11 14 16 18 0
16 12 15 17 19 0
17 13 16 16 16 0
18 15 19 19 19 0
19 16 18 18 18 0

*/


  -2 1/2  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  -0.00
 1/2 -2 1/2  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  -0.00
   0 1/2 -2  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  -0.50
   1  0   0 -4  1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  -0.00
   0  1   0  1 -4  1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  -0.00
   0  0   1  0  1 -4  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  -1.00
   0  0   0  1  0  0 -4  1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  0  -0.00
   0  0   0  0  1  0  1 -4  1  0  1  0  0  0  0  0  0  0  0  -0.00
   0  0   0  0  0  1  0  1 -4  0  0  1  0  0  0  0  0  0  0  -1.00
   0  0   0  0  0  0  1  0  0 -4  1  0  0  1  0  0  0  0  0  -0.00
   0  0   0  0  0  0  0  1  0  1 -4  1  0  0  1  0  0  0  0  -0.00
   0  0   0  0  0  0  0  0  1  0  1 -4  1  0  0  1  0  0  0  -0.00
   0  0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  1 -4  0  0  0  1  0  0  -1.00
   0  0   0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  0 -4  1  0  0  0  0  -0.00
```

```
   0  0   0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  1 -4  1  0  1  0  -0.00
   0  0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  1 -4  1  0  1  -0.00
   0  0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0  1 -2  0  0   0.00
   0  0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  0 -4  1  -0.00
   0  0   0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  0  1  0  1 -2   0.00

LU-solution:
 x[1] =    2.12684e-01
 x[2] =    4.42430e-01
 x[3] =    7.03894e-01
 x[4] =    2.04154e-01
 x[5] =    4.26570e-01
 x[6] =    6.86573e-01
 x[7] =    1.77360e-01
 x[8] =    3.73124e-01
 x[9] =    6.15829e-01
 x[10] =    1.32162e-01
 x[11] =    2.72737e-01
 x[12] =    4.03619e-01
 x[13] =    4.41643e-01
 x[14] =    7.85515e-02
 x[15] =    1.82044e-01
 x[16] =    2.84265e-01
 x[17] =    3.62954e-01
 x[18] =    9.26218e-02
 x[19] =    1.88443e-01
```

18 MINIMOINTI– LISÄYKSIÄ

Paraabeliapproksimointi on joskus hyödyllinen etsittäessä yhden muuttujan funktion minimiä, sillä paraabelin minimi on helppo löytää. Taylorin kaavan nojalla saadaan

$$f(x+h) \approx f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f''(x)h^2.$$

Minimikohdassa $h = -f'(x)/f''(x)$ kuten todetaan derivoimalla h:n suhteen. Algm on sama kuin Newtonin menetelmä sovellettuna f':uun.

Newton's method for 1D minimization

$x_0 =$ initial guess
for $k = 0, 1, 2, \ldots$
  $x_{k+1} = x_k - f'(x_k)/f''(x_k)$
end

Moniulotteisessa tapauksessa lähtökohtana on

$$f(\mathbf{x}+\mathbf{s}) \approx f(\mathbf{x}) + \nabla f(\mathbf{x})^T\mathbf{s} + \frac{1}{2}\mathbf{s}^T\mathbf{H_f}(\mathbf{x})\mathbf{s},$$

missä $\mathbf{H_f}(\mathbf{x})$ on toisten osittaisderivaattojen muodostama Hessen matriisi $\mathbf{H_f}(\mathbf{x})_{i,j} = \partial^2 f(\mathbf{x})/\partial x_i \partial x_j$. Tämä kvadraattinen funktio saa minimiarvon kun

$$\mathbf{H_f}(\mathbf{x})\mathbf{s} = -\nabla f(\mathbf{x})^T\mathbf{s}.$$

Tämä tarkastelu johtaa seuraavaan algoritmiin.

Newton's method for minimization

$\mathbf{x_0}$= initial guess
for $k = 0, 1, 2, ...$
  Solve $\mathbf{H_f}(\mathbf{x_k})\mathbf{s_k} = -\nabla f(\mathbf{x_k})$ for $\mathbf{s_k}$ { Compute Newton step }
  $\mathbf{x_{k+1}} = \mathbf{x_k} + \mathbf{s_k}$ { update solution }
end

Conjugate gradient algorithm

$\mathbf{x_0}$= initial guess
$\mathbf{g_0} = \nabla f(\mathbf{x_0})$
$\mathbf{s_0} = -\mathbf{g_0}$
for $k = 0, 1, 2, ...$
  Choose α_k to minimize $f(\mathbf{x_k}+\alpha_k\mathbf{s_k})$ {perform line search }
  $\mathbf{x_{k+1}} = \mathbf{x_k} + \alpha_k\mathbf{s_k}$ {update solution }
  $\mathbf{g_{k+1}} = \nabla f(\mathbf{x_{k+1}})$ { compute new gradient }
  $\beta_{k+1} = (\mathbf{g_{k+1}^T g_{k+1}})/(\mathbf{g_k^T g_k})$
  $\mathbf{s_{k+1}} = -\mathbf{g_{k+1}} + \beta_{k+1}\mathbf{s_k}$ { modify gradient }
end

The formula for β_{k+1} in this algorithm is due to Fletcher and Reeves. An alternative formula due to Polak and Ribiere suggests the choice

$$\beta_{k+1} = ((\mathbf{g_{k+1}} - \mathbf{g_k})^\mathbf{T}\mathbf{g_{k+1}})/(\mathbf{g_k^T g_k}),$$

which sometimes is better.

Newtonin menetelmään pohjautuva minimointi on toteutettu esimerkkiohjelmassa `mynewmin.cpp` ja konjugaattigradienttimenetelmä ohjelmassa `mycgrad2.cpp`. Newtonin algm käyttää osanaan numeerisen Hessen matriisin laskentaa, ks. `mynumhes3.cpp`.