САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
SAMARA UNIVERSITY

Кафедра программных систем

Заболотнов Юрий Михайлович

Самара 2022

Основная литература:

1. Коварцев А.Н. Вычислительная математика. Самара: ООО «Офорт»., 2011. 230 с.
2. Вержбицкий В. М. Основы численных методов . М: Высш. шк., 2009. 839. с.
3. Бахвалов Н.С, Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. М.: Наука, 1987. 600 с.
4. Тихонов А.Н., Костомаров Д.П. Вводные лекции по прикладной математике . М.: Наука, 1984. - 190 с.
5. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1980.-535 с.
6. Волков Е.А. Численные методы. – М.: Наука, 1987. – 248 с.
7. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. – М. :Наука, 1970. - 664 с.
8. Заболотнов Ю.М. Методические указания к лабораторным работам по вычислительным методам. Кафедра программных систем. Сам. ун-т. 2020. 67 с.

Дисциплина «Вычислительные методы» или «Вычислительная математика» предполагает изучение численных методов, которые составляют основу компьютерного или математического моделирования поведения систем, процессов и других объектов реального мира.

1. Объект моделирования (система, явление, процесс…)
2. Субъект моделирования (исследователь, специалист…)
3. Математическая модель

Модель - объект-заменитель объекта-оригинала, обеспечивающая изучение **некоторых свойств** объекта-оригинала.

Замещение объекта-оригинала моделью с целью изучения некоторых свойств объекта-оригинала путем проведения экспериментов с моделью называется **моделированием**.

Математическая модель (ММ) – приближенное описание объекта-оригинала с помощью математической символики (арифметические и логические операции, алгебраические и дифференциальные уравнения, интегралы и т.д.)

Адекватность модели. Если результаты моделирования подтверждаются и могут служить для прогнозирования поведения объекта-оригинала, то говорят, что **модель адекватна.**

Адекватность – понятие субъективное !

Различают: формальную математическую модель и численную математическую модель.

Построение формальной ММ заключается в записи ММ в виде математической символики и не связано с использованием ее при моделировании.

Численная ММ получается применением к ММ численного метода, который реализуется в виде алгоритма и программы на компьютере, и служит для получения численных результатов.

Верификация – процесс установления соответствия между численной и формальной ММ.

Валидация - процесс установления соответствия между численной моделью и поведением объекта-оригинала.

Верификация и валидация имеют субъективный характер

Классификация ММ.

1. В соответствии с полнотой описания.

Различают полные, неполные и аналитические ММ.

Полные ММ описывают поведения объекта на уровне современного научного знания. **Неполные ММ** получаются из полных ММ с помощью некоторых упрощений и допущений, причем неполнота ММ может быть разной. Аналитические ММ – самые простые ММ, которые представляют собой аналитические формулы, связывающие входные и выходные характеристики объекта-оригинала.

2**. По способу получения.**

Различают теоретические и эмпирические ММ. **Теоретические ММ** получаются на основании известных законов (механики, физики, экономики…). **Эмпирические ММ** – на основании обработки измерений, которые осуществляются на объекте-оригинале.

3. **По характеру изучаемых процессов.** Различают непрерывные и дискретные. Например, дифференциальное уравнение $dx/dt = F(x,t)$

где $F(x,t)$ - непрерывная функция , представляет собой непрерывную ММ.

С другой стороны разностное уравнение

Классификация ММ.

3. **По характеру изучаемых процессов.** Различают непрерывные и дискретные. Например, дифференциальное уравнение $dx/dt = F(x,t)$

где $F(x,t)$ - непрерывная функция , представляет собой **непрерывную ММ.**

С другой стороны разностное уравнение $x_{m+1} = x_m + G(x_m, t_m)$
где $G(x_m, t_m)$ - известная функция, t_m - дискретные моменты времени, представляет собой **дискретную ММ.**

Замечание: во многих случаях, численные ММ являются дискретными и получаются из теоретических непрерывных посредством дискретизации по времени или по координатам.

4. **По отношению к случайным явлениям.** Различают **детерминированные стохастические ММ.**

В детерминированных ММ случайными величинами и случайными процессами пренебрегают. В стохастических ММ – учитывают.

5. **По отношению к времени.** Различают **статические и динамические ММ.**

Статические ММ – не зависят от времени (это, как правило, алгебраические системы уравнений). **Динамические ММ** зависят от времени (это, чаще всего, дифференциальные уравнения)

ул. Московское шоссе, д.34, г.Самара, 443086, тел.: +7 (846) 335-18-26, факс: +7 (846) 335-18-36, сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru

Математическое моделирование на компьютере. Основные этапы.

Рисунок 1

ул. Московское шоссе, д.34, г.Самара, 443086, тел.: +7 (846) 335-18-26, факс: +7 (846) 335-18-36, сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru

Пусть $y = F(x)$ - некоторый оператор преобразования входного вектора численной ММ $x_i\,(i = 1, 2, \ldots n)$ в ее выходной вектор $y_j\,(j = 1, 2, \ldots m)$

1. Погрешность.

Абсолютная $\delta_j = |\tilde{y}_j - y_j|$, **относительная** $\varepsilon_j = \left|\frac{\tilde{y}_j - y_j}{y_j}\right|$

где $\tilde{y}_j$ - приближенное значение некоторой характеристики численной ММ, y_j - эталонное значение.

Эталонное значение обычно определяется по более полной ММ или если есть результат измерений на объекте-оригинале.

При $y_j \approx 0$ относительная погрешность не используется из-за особенности в формуле.

2**. Область адекватности по входным данным.**

Например, $D \subset \{x \;/\; \varepsilon_j \le \bar{\varepsilon}, \forall j\}$ где $\bar{\varepsilon}$ - допустимое значение погрешности.

3. Экономичность численной ММ характеризуется:

временными затратами на расчет (количество элементарных операций) T_M и затратами памяти при реализации ММ P_M

Возможные постановки задачи при построении численной ММ

1. $\min T_M$, если $P_M \le \overline{P}_M$, $\varepsilon_j \le \overline{\varepsilon}$
2. $\min \max_i (\varepsilon_i)$, если $P_M \le \overline{P}_M$, $T_M \le \overline{T}_M$
3. $\min P_M$, если $\varepsilon_j \le \overline{\varepsilon}$, $T_M \le \overline{T}_M$

4. Сходимость дискретной (численной) ММ.

Например, приближенное вычисление определенного интеграла методом прямоугольников

$$J = \int_a^b f(x)dx \approx \tilde{J}_n = \sum_{i=1}^{n} S_n$$

где n - количество элементарных прямоугольников.

Свойство сходимости $\lim\limits_{n\to\infty} \tilde{J}_n = J$

Замечание: сходимость – это теоретическое понятие, так как определяется без учета погрешности представления чисел в компьютере.

ул. Московское шоссе, д.34, г.Самара, 443086, тел.: +7 (846) 335-18-26, факс: +7 (846) 335-18-36, сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru

4. Корректность численной ММ по исходным данным.
Если исходная формальная ММ (например, дифференциальное уравнение) корректно построена, то есть в некоторой области исходных данных $x \in D$ ее решение существует, единственно и непрерывно зависит от изменения исходных данных, то численная ММ должна обладать теми же свойствами.
5. **Устойчивость численной ММ или алгоритма.**
Во многих задачах вычислительной математики количество элементарных операций может быть очень большим. В процессе вычислений неизбежно возникают погрешности, связанные неточностью выбранного метода (методическая погрешность) и неточностью представления чисел в компьютере (вычислительная погрешность). Возможны два случая: 1) в процессе вычислений погрешность остается ограниченной; 2) погрешность неограниченно возрастает. В последнем случае говорят о неустойчивости численной ММ или алгоритма. Данные рассуждения имеют качественный характер, однако в некоторых конкретных задачах более строгие оценки устойчивости существуют.


ММ на микро уровне
ММ на макро уровне
ММ на мета уровне
ДУ в частных производных
Обыкновенные ДУ
Аналитические и логические уравнения
Нелинейные системы алгебраических уравнений
Системы линейных алгебраических уравнений
Итерационные методы
Методы преобразований
Элементарные арифметические и логические операции

Рисунок 2

Погрешности при численном моделировании могут возникнуть на всех этапах численного моделирования на компьютере (слайд 7).

Все погрешности можно условно разделить на две класса:

1) неустранимые; 2) устранимые.

К неустранимым погрешностям с точки зрения вычислительной математики относятся: неточность формальной ММ и погрешность знания исходных данных (вектора *x*). Под устранимыми погрешностями понимаются такие погрешности, которые человек может уменьшать посредством изменения параметров численной ММ. Понятно, что уменьшение погрешностей имеет свой предел. Это связано с возможностями численного метода и неточностью представления чисел в компьютере.

Тогда к устранимым погрешностям можно отнести:

1. Методическую погрешность, связанную со свойствами выбранного численного метода
2. Вычислительную погрешность, связанную с неточностью представления чисел в компьютере.

1.Методическая погрешность – это чаще всего в вычислительных методах погрешность дискретизации. В общем случае, изменяя параметры дискретизации, эту погрешность можно уменьшить.

Пример. Приближенное вычисление интеграла методом прямоугольников

$$J = \int_a^b f(x)\,dx \approx \tilde{J}_n = \sum_{i=1}^{n} S_n$$

Тогда $\left|\tilde{J}_n - J\right| = \delta(n)$ и методическая погрешность зависит от параметра дискретизации n , увеличивая значения которого можно уменьшить погрешность.

2. **Вычислительная погрешность.**

Уменьшение методической погрешности с помощью изменения параметров дискретизации неизбежно ограничивается **вычислительной погрешностью**, которая всегда присутствует при компьютерном моделировании. Поэтому с точки зрения вычислительной математики выполнение условия сходимости $\lim\limits_{n\to\infty} \tilde{J}_n = J$ невозможно.

Пример.

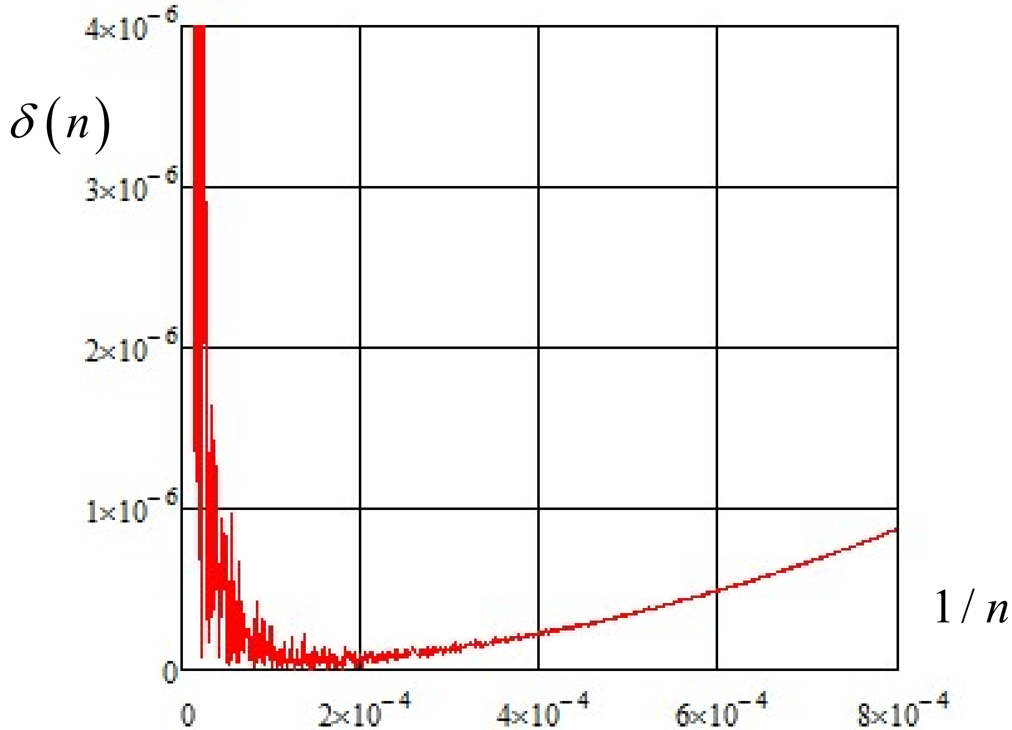

Рисунок 3

Замечание. Вычислительную погрешность можно уменьшить, вводя вычисления с двойной, тройной и т. д. точностью представления чисел, что позволяют сделать некоторые языки программирования. Однако это качественно не изменяет результаты расчетов.

ул. Московское шоссе, д.34, г.Самара, 443086, тел.: +7 (846) 335-18-26, факс: +7 (846) 335-18-36, сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru

Вычислительная погрешность связанна с параметрами машинной арифметики, которые используются в компьютере.

Параметры машинной арифметики.

1. Форма представления числа.

Различают: а) с фиксированной запятой; б) с плавающей запятой.

2. Способ округления чисел.

Различают: а) отбрасывание высших разрядов; б) правильное округление

В современных компьютерах используется представление с плавающей запятой и правильное округление.

Представление числа с плавающей запятой: $a = \pm M \cdot p^{\pm k}$

где M - мантисса числа, $p > 1$ - основание системы исчисления,

k - порядок числа.

От количества двоичных разрядов, отводимых на представления мантиссы и порядка, зависит диапазон чисел и относительная погрешность представления числа в компьютере.

Диапазон чисел с точностью до знака: $M_0 \le a \le M_\infty$,

где M_0 - машинный ноль, M_∞ - машинная бесконечность.

Относительная погрешность представления числа $\varepsilon \approx 2^{-t}$,

где t - количество двоичных разрядов для представления.

Для пакета Mathcad: $M_0 \approx 10^{-15}$, $M_\infty \approx 10^{307}$.

Пример влияния вычислительной погрешности.
Рассмотрим итерационную формулу:

$$y_0 = 1, \quad y_k = \left(\frac{y_{k-1}}{k}\right)k, \quad k = 1,\ldots N$$

В общем случае это тождество, то есть $y_k \equiv 1$,
однако влияние вычислительной погрешности приводит к $y_k \neq 1$.
Причем, чем больше *N* , тем погрешность больше

$N := 10^5 \qquad y_0 := 1$

$k := 1..N$

$y_k := \left(\frac{y_{k-1}}{k}\right)\cdot k \qquad \varepsilon_k := \left|y_k - 1\right|$

$\varepsilon_N = 1.088 \times 10^{-14} \qquad \ln(\varepsilon_N) = -32.152$

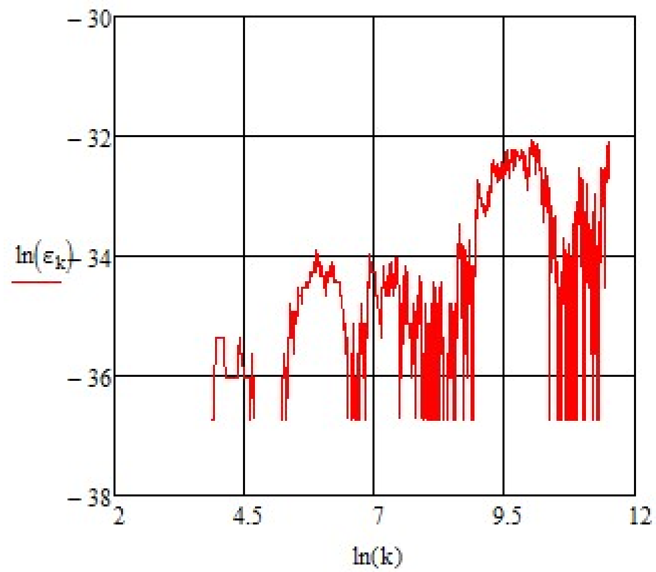

Рисунок 4

САМАРСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ
SAMARA UNIVERSITY

Спасибо за внимание

e-mail: yumz@yandex.ru

ул. Московское шоссе, д. 34, г. Самара, 443086
Тел.: +7 (846) 335-18-26 , факс: +7 (846) 335-18-36
Сайт: www.ssau.ru, e-mail: ssau@ssau.ru