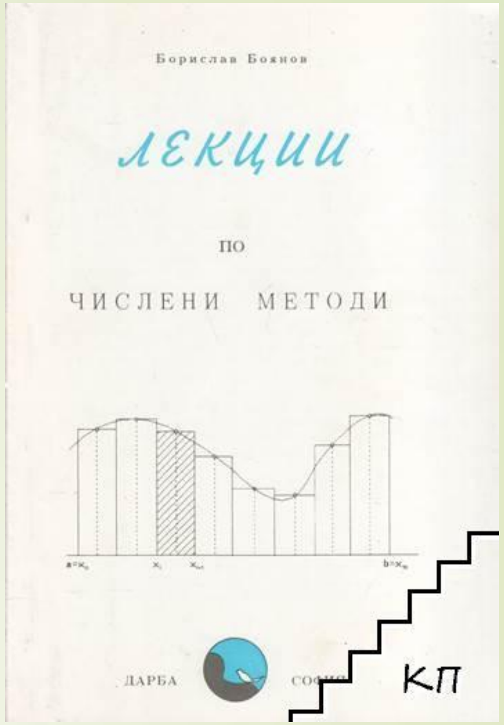
Примери
от научните изчисления

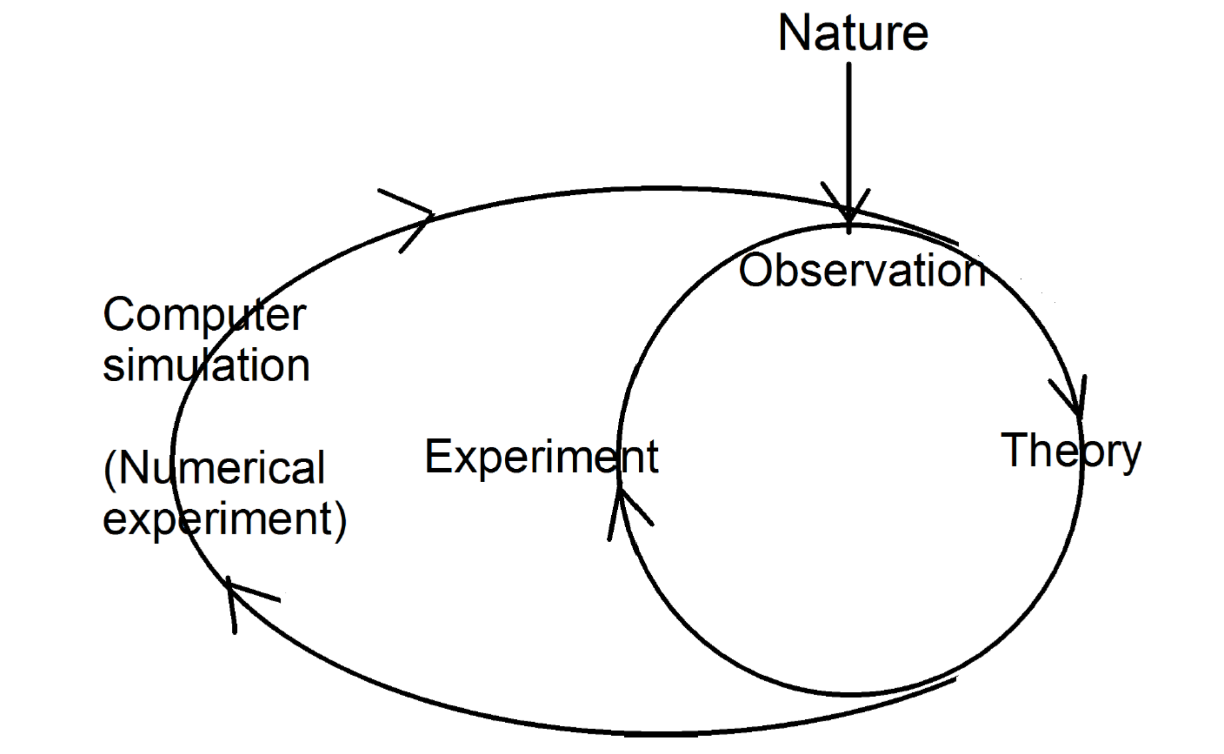
- Тази лекция е незадължителна и е извън материала по СДП. Нейната цел е да разгледаме два класически примера от научните изчисления, с които да покажем незаменимата роля на компютъра в съвременната математика и в науката въобще.

- Първият пример е много прост, но дълбок - пресмятане на интеграл с **квадратурната формулата на правоъгълниците**. Избран е заради простотата и символното му зна – чение. Картинката на тази формула стои на корицата на учебника по **Числени методи** на **академик Борислав Боянов** (човекът, чийто паметник е пред входа на факултета).



- Вторият пример е по-сложен и много дълбок. Той е компютърната симулация на уравнението на **Кортевег – де Фриз** - едно от най-важните уравнения в математическата физика. Ние ще направим възстановка на откритието през 1965 година на солитонните решения на това уравнение. Счита се, че това откритие е най-големият принос на компютъра за математическата физика въобще. Солитонът е уединена вълна, която се държи като частица. Името идва от английското **solitary** (уединен) и окончанието **он** (окончанието за частици - като протон, електрон, неутрон).

Modern scientific method

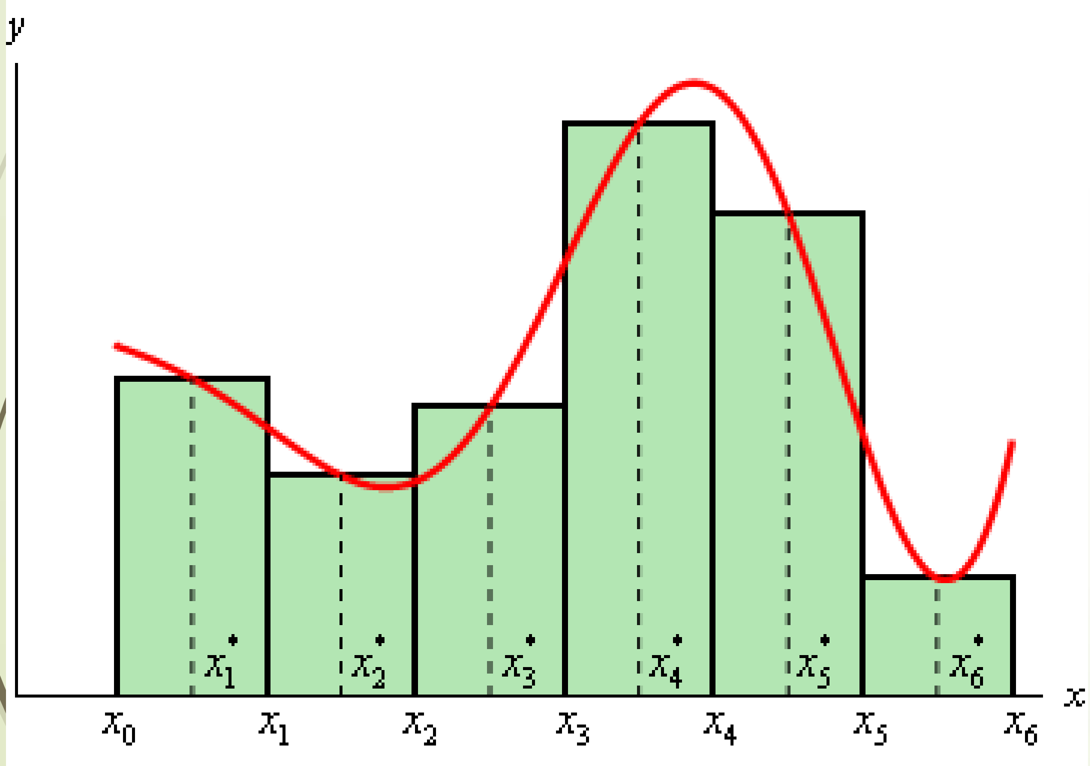


Освен основните компоненти наблюдение, теория и експеримент, съвременният научен метод включва и компютърната симулация, която често се нарича числен експеримент. Компютърната симулация се провежда например в случаите, когато нормалният експеримент е невъзможен, скъп или нехуманен. Тя се осъществява чрез решаване с компютър на математическите уравнения, описващи даденото явление. Тези уравнения всъщност представляват теорията.

Намирането на определен интеграл се среща често в научните изчисления

Midpoint Rule (формула на правоъгълниците)

Заменяме интеграла (лицето на криволинейния трапец) със сумата от лицата на правоъгълниците



$$\int_a^b f(x)\,dx \approx h\,[f(x_1^*) + f(x_2^*) + \cdots + f(x_n^*)]$$

$$h = \frac{b-a}{n}$$

Частен случай – изчисление на интегралите на Френел $S(x)=\int_0^x \sin(t^2)\,dt$ $C(x)=\int_0^x \cos(t^2)\,dt$

- Не съществуват елементарни функции, чиито производни са равни на подинтегралните функции $\sin(t^2)$ и $\cos(t^2)$. Макар че интегралите на Френел могат да се представят като безкрайни суми, тези суми не са удобни за изчислението им. Какво правим тогава? Отговор: Можем да приложим формулата на правоъгълниците.

$$S(x)=\int_0^x \sin(t^2)\,dt=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{4n+3}}{(2n+1)!(4n+3)}.$$

$$C(x)=\int_0^x \cos(t^2)\,dt=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{x^{4n+1}}{(2n)!(4n+1)}.$$

Откриване на солитоните в уравнението на Кортевег – де Фриз

Nature is nonlinear. That does not mean it is chaotic, although chaos sometimes occurs. It does not mean instability, although solutions can blow up. In some cases the nonlinear effects are *stabilizing*, and a differential equation that is forced to choose among many solutions will choose the best one. In other cases solutions remain smooth, and a change of variables makes the problem linear. That is an everyday event for ordinary differential equations, but it was an extraordinary event for partial differential equations. Solitary waves appeared on the computer, they were unmistakably regular, and the theory of solitons followed. Possibly this is the deepest contribution to mathematical physics the computer will ever make. It lies at the other extreme from the chaotic numerical experiments with $u_{n+1} = au_n - au_n^2$, but it was totally unexpected and beautiful.

Introduction to applied mathematics, ***Professor Gilbert Strang, MIT***

VOLUME 15, NUMBER 6 PHYSICAL REVIEW LETTERS 9 AUGUST 1965

INTERACTION OF "SOLITONS" IN A COLLISIONLESS PLASMA AND THE RECURRENCE OF INITIAL STATES

N. J. Zabusky

Bell Telephone Laboratories, Whippany, New Jersey

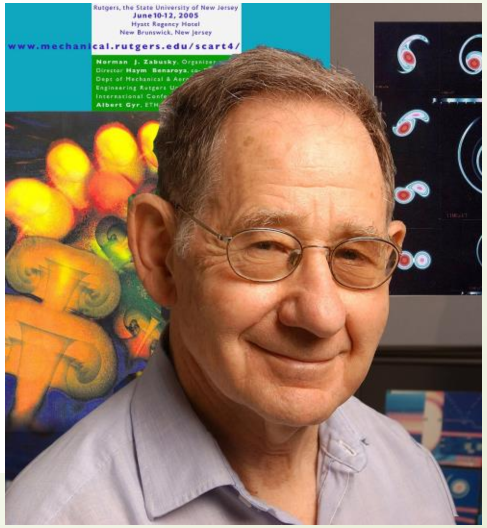
and

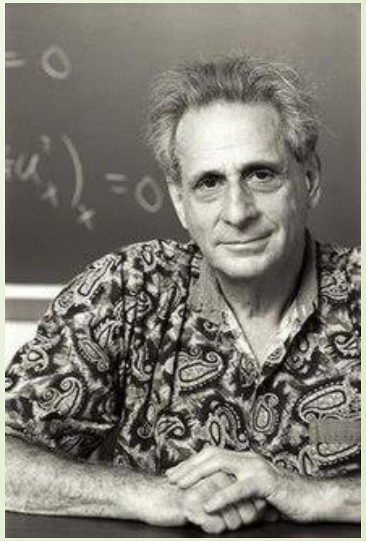
M. D. Kruskal

Princeton University Plasma Physics Laboratory, Princeton, New Jersey
(Received 3 May 1965)

We have observed unusual nonlinear interactions among "solitary-wave pulses" propagating in nonlinear dispersive media. These phenomena were observed in the numerical solutions of the Korteweg-deVries equation

$$u_t + uu_x + \delta^2 u_{xxx} = 0. \qquad (1)$$





- В първия пример (формулата на правоъгълниците) заменяме определения интеграл с някаква специална Риманова сума. Във втория пример (уравнението на Кортевег – де Фриз) заменяме производните с разделени разлики (дискретни аналози на производните и обобщение на понятието диферентно частно) (виж цитат 6 от статията на Забуски и Крускал).
  И в двата случая, дискретизираме изходната задача, като използваме нещо просто и първично, и получаваме една голяма сметка (хиляди , милиони аритметични операции). Тази сметка я даваме на компютъра и го оставяме го да направи това, което е неговата сила – да изчислява бързо.

- Има аналогия между начина, по който действа компютърната симулация и реалният начин, по който се случват процесите в природата – процесите в макросвета са в резултат на интегрирането на простите закони на микро ниво.

- Както се досещате, в научните изчисления програмирането е по - лесната част. Трудната, менталната част е математическото обосноваване, че решението на дискретната задача е сходящо към решението на оригиналната задача и че компютърният алгоритъм за решаването на дискретната задача е устойчив. Т.е. трудният и важният въпрос е как да решаваме задачите математически правилно.

- Типично за много научни задачи е тяхната изчислителна интензивност. Нашите примери не бяха такива. Представете си обаче, че трябва да симулирате еволюционен процес в тримерното пространство (интегралът и уравнението на Кортевег – де Фриз бяха само едномерни!). Ако в едномерния случай дискретизираме с 1000 точки, то в тримерния ще са 1000x1000x1000. Милион пъти повече. Като добавим и еволюцията по времето, аритметичните операции стават наистина много, постижими само за суперкомпютър.

- Ще завършим тази лекция с една много актуална мисъл на член кореспондента на РАН **Владимир Воеводин**, директор на научно-изследователския център на Московския Държавен Университет:

«До сих пор специалистов в области вычислительной математики учили, как решать задачи математически правильно. Теперь надо, к тому же, учить, как решать задачи эффективно на современной вычислительной технике. А это совсем другая наука, математическая по своей сути, но которую пока почти не изучают в вузах. »