Вычислительная математика

Лекция 1

Исупов К. С.
ks_isupov@vyatsu.ru

6 сентября 2021 г.

План

1. Введение
   - Историческая справка
   - Факторы успешного решения важных задач с помощью современных вычислительных систем
   - Актуальность развития вычислительной математики
   - Этапы решения математических задач
   - Методы решения задач
2. Рабочая программа дисциплины
   - Цель и задачи
   - Модульный план
   - Объем занятий
   - Литература
3. Погрешности результата численного решения
   - Классификация погрешностей
   - Корректность и обусловленность задачи
4. Примеры катастрофического влияния погрешностей
5. Устранение влияния ошибок округления
6. Экономичность вычислительного метода

Введение

Историческая справка

- Изначально математика была полностью численной наукой и имела целью получение решения в виде числа, поэтому численное решение прикладных задач всегда интересовало математиков.
- С появлением ЭВМ менее чем за 60 лет скорость выполнения арифметических операций выросла с 0.1 оп/с. при ручном счете до $187 \cdot 10^{15}$ оп/с (вычислительная машина Summit — IBM Power System AC922 + NVIDIA Volta GV100, содержащая 2 282 544 ядер).
- Мнение о том, что ЭВМ «всемогущи» и нет нужды разрабатывать новые численные методы является **ошибочным**.
- Суть математизации — построение математических моделей процессов и явлений природы, разработка методов их исследования.

Факторы успешного решения важных задач с помощью современных ЭВМ

1. Увеличение быстродействия вычислительных систем, расширение памяти, совершенствование структуры, снижение стоимости арифметической операции и единицы памяти.
2. Разработка программных средств ЭВМ: языки программирования, библиотеки и пакеты стандартных подпрограмм, снижение требований к математической и программистской культуре при работе с вычислительной системой.
3. Рост понимания процессов и явлений природы, создание их математических моделей.
4. Совершение существующих и создание новых методов решения прикладных задач.
5. Понимание возможностей применения вычислительных систем, координация усилий специалистов по использованию вычислительной техники.

Введение

Актуальность развития вычислительной математики

- Эффект от использования новых численных методов по порядку сравним с эффектом, достигаемым за счет повышения производительности ЭВМ.
- Современный этап внедрения многопроцессорных ЭВМ ставит актуальные проблемы новых программных средств и новых численных методов на основе распараллеливания вычислений.

Этапы решения математических задач

1. Физическая постановка.
2. Поиск, выбор и/или модификация математической модели, ее априорное обоснование.
3. Разработка, выбор и/или модификация математического метода.
4. Составление алгоритма.
5. Разработка программного обеспечения.
6. Непосредственно решение задачи и анализ результатов. Апостериорное обоснование математической модели и метода.

Методы решения задач

- Аналитические: позволяют получать точное решение в виде математических формул, уравнений. Класс задач, для которых они применимы, **весьма ограничен**.
- Численные методы: дают не общие, а частные решения в дискретных областях изменения неизвестных переменных и аргументов, отрезок прямой рассматривается как система точек, вместо непрерывной функции — табличная, вместо производной — ее разностная аппроксимация.

Рабочая программа дисциплины

Цель и задачи

1. **Цель**: получение знаний о численных методах решения типовых вычислительных задач и формирование навыков их практического применения.
2. **Задачи**:
   - *изучить*: численные методы линейной алгебры, методы решения нелинейных уравнений и систем, численное интегрирование и дифференцирование, методы приближения функций, численные методы решения ОДУ
   - *знать*: методы оценки погрешностей и определение устойчивости решения
   - *уметь*: выполнить переход от словесного описания прикладной задачи к её математической постановке, выбрать эффективный метод решения и либо самостоятельно разработать программное обеспечение, либо использовать стандартное математическое обеспечение ЭВМ

Модульный план

1. Погрешности результата численного решения.
2. Методы решения нелинейных уравнений.
3. Методы решения систем линейных и нелинейных уравнений.
4. Методы приближения функций. Интерполяция. Среднеквадратичное и равномерное приближение. Метод наименьших квадратов.
5. Численное интегрирование и дифференцирование. Погрешности квадратурных формул.
6. Численные методы решения дифференциальных уравнений.

Рабочая программа дисциплины

Объем занятий

1. 36 часов лекций
2. 18 часов практических занятий
3. 18 часов (на каждую подгруппу) лабораторных работ

Форма промежуточной аттестации — зачет.

Рабочая программа дисциплины

Литература

1. Sauer, Timothy. Numerical analysis. 2nd ed. Boston: Pearson, 646 pp, 2012. Print.
2. Вержбицкий, Валентин Михайлович. Основы численных методов : учеб. / В. М. Вержбицкий. - 2-е перераб.. - М. : Высш. шк., 2005. - 840 с.
3. Жидков, Е. Н. Вычислительная математика: учебник для студ. учреждений высш. проф. образования / Е. Н. Жидков.- 2-е изд., перераб. - М.: Издательский центр «Академия», 2013. - 208 с.
4. Вержбицкий, Валентин Михайлович. Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения) : учеб. пос. / В. М. Вержбицкий. - 2-е изд., испр.. - М. : ОНИКС 21 век, 2005. - 432 с.
5. Вержбицкий, Валентин Михайлович. Численные методы. Математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения : учеб. пос. / В. М. Вержбицкий. - 2-е изд., испр.. - М. : ОНИКС 21 век, 2005. - 400 с.
6. Копченова, Н. В., Марон И. А. Вычислительная математика в примерах и задачах: учеб. пос. - СПб. : «Лань», 2009. - 368 с.
7. Задания к лабораторному практикуму [Электронный ресурс] : метод. указания к выполнению лаб. практикума для студентов специальности 230101 (220100). Дисциплина "Вычислительная математика". Специальность 230101 (220100), II курс / ВятГУ, ФАВТ, каф. ЭВМ.
8. Higham, N. J. Accuracy and Stability of Numerical Algorithms. 2nd ed. Philadelphia : SIAM, 2002.
9. Overton, M. L. Numerical Computing With IEEE Floating Point Arithmetic Including One Theorem, One Rule of Thumb, and One Hundred and One Exercises. Philadelphia :SIAM, 2001. 106 p.
10. J.-M. Muller, N. Brisebarre, F. de Dinechin, C.-P. Jeannerod, V. Lefèvre, G. Melquiond, N. Revol, D. Stehlé and S. Torres. Handbook of Floating-Point Arithmetic. Birkhäuser Boston, 2010.

Погрешности результата численного решения

Классификация погрешностей

- Неустранимые погрешности, причиной которых является неточное математическое описание задачи, вызванное ограниченностью объема исходных данных.
- Погрешности дискретизации: получение точного решения возникающей в природе задачи требует неограниченного или неприемлемо большого числа арифметических операций, поэтому приходится прибегать к дискретизации по времени и пространству, получая приближенный результат вместо точного непрерывного решения.
- Вычислительная погрешность, возникающая из-за неизбежных округлений при выполнении вычислительных операций в арифметике с конечной точностью.

Области, критичные к ошибкам округления

Необходимость использования вычислений с высокой точностью возникает в следующих ситуациях.

- При решении плохо обусловленных систем линейных уравнений и сопряженных задач линейной алгебры.
- При решении жестких систем обыкновенных дифференциальных уравнений.
- При вычислении рекуррентных формул и больших сумм.
- При продолжительном моделировании физических процессов.
- При крупномасштабном моделировании.
- При исследовании процессов микромира.
- При поиске целочисленных отношений в экспериментальной математике.

Погрешности результата численного решения

Корректность постановки задачи

1. Вычислительная задача поставлена корректно, если (Жак Адамар):
   - решение существует при любых входных данных,
   - решение единственно,
   - решение устойчиво.

Обусловленность

- Задача хорошо обусловлена: малым изменениям входных данных соответствуют такие же малые изменения результатов.
- Задача плохо обусловлена: при небольших возмущениях исходной информации возможны сильные изменения в решении.
- **Число обусловленности** μ — коэффициент возможного возрастания погрешности решения (y) по отношению к вызвавшим их погрешностям входных данных (x):

$$\mu_\Delta = \frac{\Delta(y)}{\Delta(x)}, \qquad \mu_\delta = \frac{\delta(y)}{\delta(x)},$$

  где μ_Δ — абсолютное число обусловленности, μ_δ — относительное число обусловленности.
- Если $\mu_\delta >> 1$, то задача считается плохо обусловленной.
- Если $\mu_\delta = 10^n$, то, грубо говоря, при потере каждой верной цифры входных данных будет потеряно n верных цифр в решении.

Примеры катастрофического влияния погрешностей

Плохая обусловленность

Пусть дана система двух линейных уравнений:

$$\begin{cases} 300x_1 + 400x_2 = 700, \\ 100x_1 + 133x_2 = 233. \end{cases} \tag{1}$$

Точное ее решение: $x_1 = 1, x_2 = 1$. Изменим незначительно правую часть второго уравнения на (вместо 233 запишем 232):

$$\begin{cases} 300x_1 + 400x_2 = 700, \\ 100x_1 + 133x_2 = 232. \end{cases} \tag{2}$$

В результате получим новое решение: $\widetilde{x}_1 = -3, \widetilde{x}_2 = 4$. При изменении входных данных на 0.43% получили изменение решения соответственно в 3 и 4 раза. **Вывод**: задача плохо обусловлена.

Влияние выбора алгоритма

Пусть функция $\sin x$ вычисляется с помощью ряда Тейлора:

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^6}{7!} + \ldots \tag{3}$$

- Примем $x = 0.5236(30^\circ)$ и будем учитывать члены ряда $> 10^{-4}$. Тогда при вычислениях с 4 значащими цифрами: $\sin(0.5236) = 0.5000$ (правильно).
- Примем $x = 25.66(1470^\circ)$ и будем учитывать члены ряда $> 10^{-8}$. Тогда при вычислениях с 8 значащими цифрами: $\sin(25.66) = 24.254$ (неверно).

Вывод: формула (3) не пригодна для больших углов (нужно использовать формулы приведения).

Примеры катастрофического влияния погрешностей

Влияние выбора алгоритма

Пусть функция e^x вычисляется с помощью ряда Тейлора:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots \qquad (4)$$

Примем $x = -5.5$ и будем учитывать 25 первых членов ряда. Тогда при вычислениях с 5 значащими цифрами: $e^{-5.5} = 0.0026363$ (верный результат: 0.00408677).

Вывод: произошла катастрофическая потеря верных значащих цифр, так как при отрицательном аргументе ряд (4) стал знакочередующимся, а слагаемые стали превосходить конечный результат на несколько порядков (ошибка округления была сопоставима с результатом).

Решение: использовать другую формулу:

$$e^{-5.5} = \frac{1}{e^{5.5}} = \frac{1}{1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots}. \qquad (5)$$

Тогда при вычислениях с теми же параметрами получим: $e^{-5.5} = 0.0040865$, $\delta = 0.007\%$.

Итерационные вычисления

Пусть вычисляется рекуррентное соотношение:

$$u_{i+1} = q u_i, \quad i \geq 0, \quad u_i > 0, \quad q > 0, \quad u_0 = a. \qquad (6)$$

Пусть при вычислениях с ограниченной длиной мантиссы на i-м шаге возникла погрешность округления, т.е. $\widetilde{u}_i = u_i + \delta_i$. Тогда

$$\widetilde{u}_{i+1} = q(u_i + \delta_i) = q u_i + q\delta_i = u_{i+1} + \delta_{i+1} \Rightarrow \delta_{i+1} = q\delta_i, i = 0, 1, 2, \dots \qquad (7)$$

Вывод: если $|q| > 1$, то в процессе вычислений возникшая погрешность будет возрастать (алгоритм не устойчив), и напротив, при $|q| < 1$ ошибка возрастать не будет (алгоритм устойчив).

Устранение влияния ошибок округления

- Многоразрядные позиционные методы, основанные на использовании различных вариаций позиционных форматов представления многоразрядных чисел (GMP, MPFR, ARPREC, MPFUN, DDFUN,...): *последовательность бит мантиссы представляется в виде набора блоков — цепочки чисел меньшей разрядности, которые рассматриваются как составные части одного длинного числа со взвешенными разрядами.* ***Недостаток****: высокая сложность.*

- Символьные вычисления, лежащие в основе известных систем компьютерной алгебры, таких как Mathcad, Matlab, Mathematica, Macsyma, Reduce и др: *аналитические преобразования математических выражений, работа с математическими формулами как с последовательностью символов.* ***Недостаток****: высокая сложность.*

- Интервальный анализ (достоверные, доказательные вычисления), как метод оценки точности вычислений: *исходные данные и промежуточные результаты представляются граничными значениями, над которыми и производятся все операции*:

$$\begin{aligned} N_A &= \left[0.60221331 \cdot 10^{24},\ 0.60221403 \cdot 10^{24}\right], \\ h &= \left[0.66260715 \cdot 10^{-26},\ 0.66260795 \cdot 10^{-26}\right], \\ N_A + h &= \left[0.60221331 \cdot 10^{24},\ 0.60221404 \cdot 10^{24}\right], \\ N_A \cdot h &= \left[0.39903084 \cdot 10^{-2},\ 0.39903181 \cdot 10^{-2}\right]. \end{aligned}$$

  Недостаток: интервалы часто оказываются неинформативными

- Методы, основанные на использовании непозиционных способов представления числовой информации в частности, системы остаточных классов (СОК): *число представляется в виде остатков от деления по выбранным взаимно-простым модулям.* ***Недостаток****: сложность выполнения немодульных операций.*

Экономичность вычислительного метода

Экономичность — минимизация числа элементарных операций при выполнении на ЭВМ.

Вычисление суммы

Пусть необходимо вычислить функцию:

$$s = 1 + x + x^2 + \cdots + x^{1023}, \quad 0 < x < 1. \tag{8}$$

- Последовательное вычисление:

$$x, x^2 = x \cdot x, \ldots x^{1023} = x^{1022} \cdot x \qquad \text{(требуется 1022 умножений и сложений)} \tag{9}$$

- Вычисление по формуле:

$$s = \frac{1 - x^{1024}}{1 - x} \qquad \text{(требуется 10 умножений, 2 вычитания, 1 деление)} \tag{10}$$

Вычисление многочлена

Пусть необходимо вычислить многочлен:

$$P(x) = a_0 + a_1 x_+ a_2 x^2 + \cdots + a_n x^n. \tag{11}$$

- Прямое вычисление («в лоб») требует $(n^2 + n/2)$ умножений.
- Схема Горнера

$$P(x) = ((\ldots((a_n x + a_{n-1})x + a_{n-2})x + \ldots + a_0 \qquad \text{(требуется } n \text{ умножений и сложений).} \tag{12}$$