СВФУ
СЕВЕРО-ВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ М.К. АММОСОВА

Вычислительные методы

О чём предмет?

Вычислительная математика изучает алгоритмы решения задач непрерывной математики

- **Алгоритм** – последовательность элементарных операций для получения **числового ответа**.
- **Непрерывная математика** – решаемые задачи содержат непрерывные переменные ($\mathbb{R}^n$, $\mathbb{C}^n$)

Примеры задач

- Вычисление стандартных функций:

$$\sqrt{x}, sin(x), 1/x$$

- $f'(x), \int_a^b f(x)\,dx$
- Решение нелинейных уравнений: $f(x) = 0$
- Решение линейных систем $Ax = b$
- Вычисление собственных чисел: $Av = \lambda v$

Примеры задач

- Поиск экстремума функционала: $F(\vec{x}) \to \min$
- Решение нелинейных ОДУ:

$$u'(t) = f(t, u)$$

- Решение уравнений в частных производных:

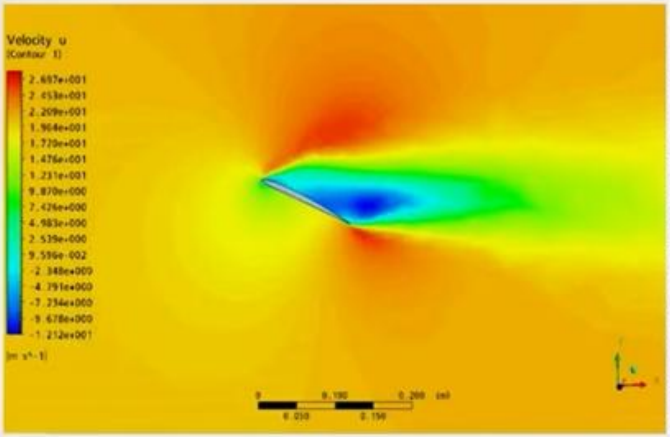
$$\Delta u(x, y) = f(x, y)$$

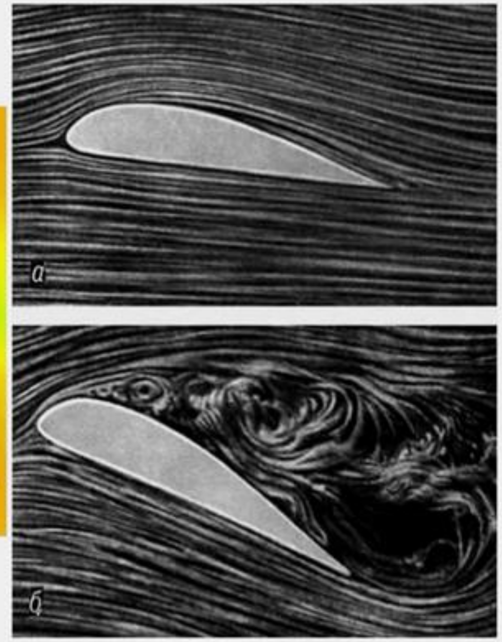
Области приложения методов вычислительной математики

- Математическое моделирование
  - Физика
  - Химия
  - Биология
  - Экономика
  - ...
- Математическая статистика
- Анализ данных, машинное обучение
- Обработка сигналов и изображений
- ...

Расчеты аэродинамики

Проблема: формирование вихря на крыле ведет к нестабильности полета и дополнительным потерям топлива.

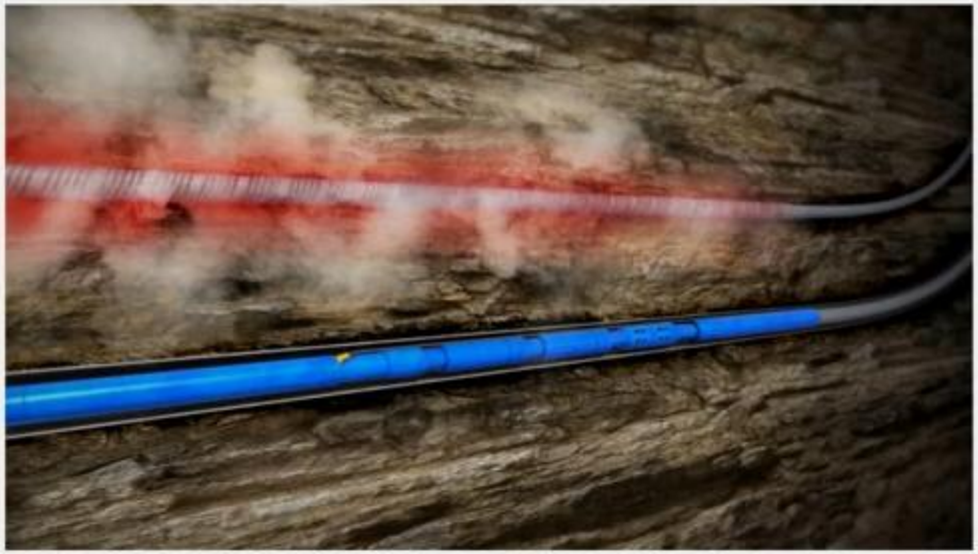


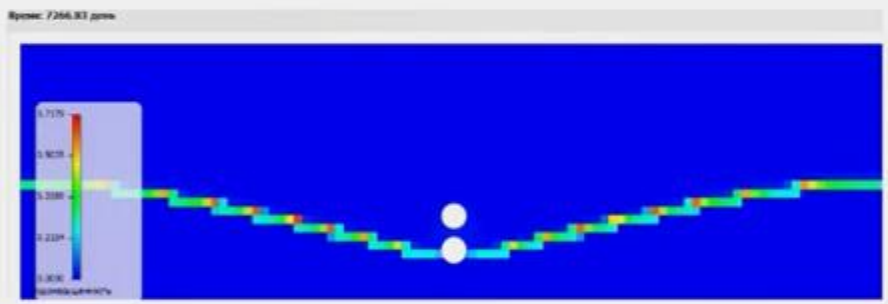


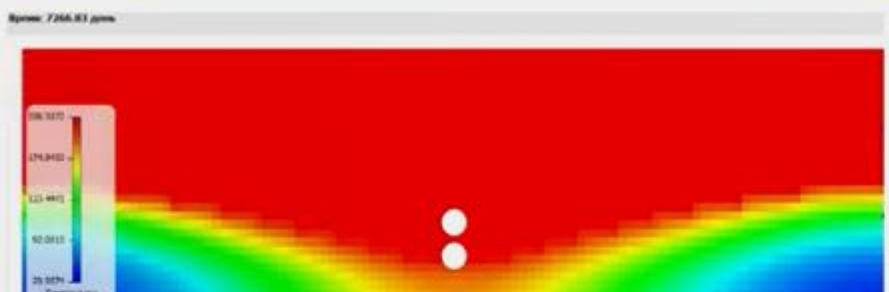
ı аэродинамики

Flightradar24

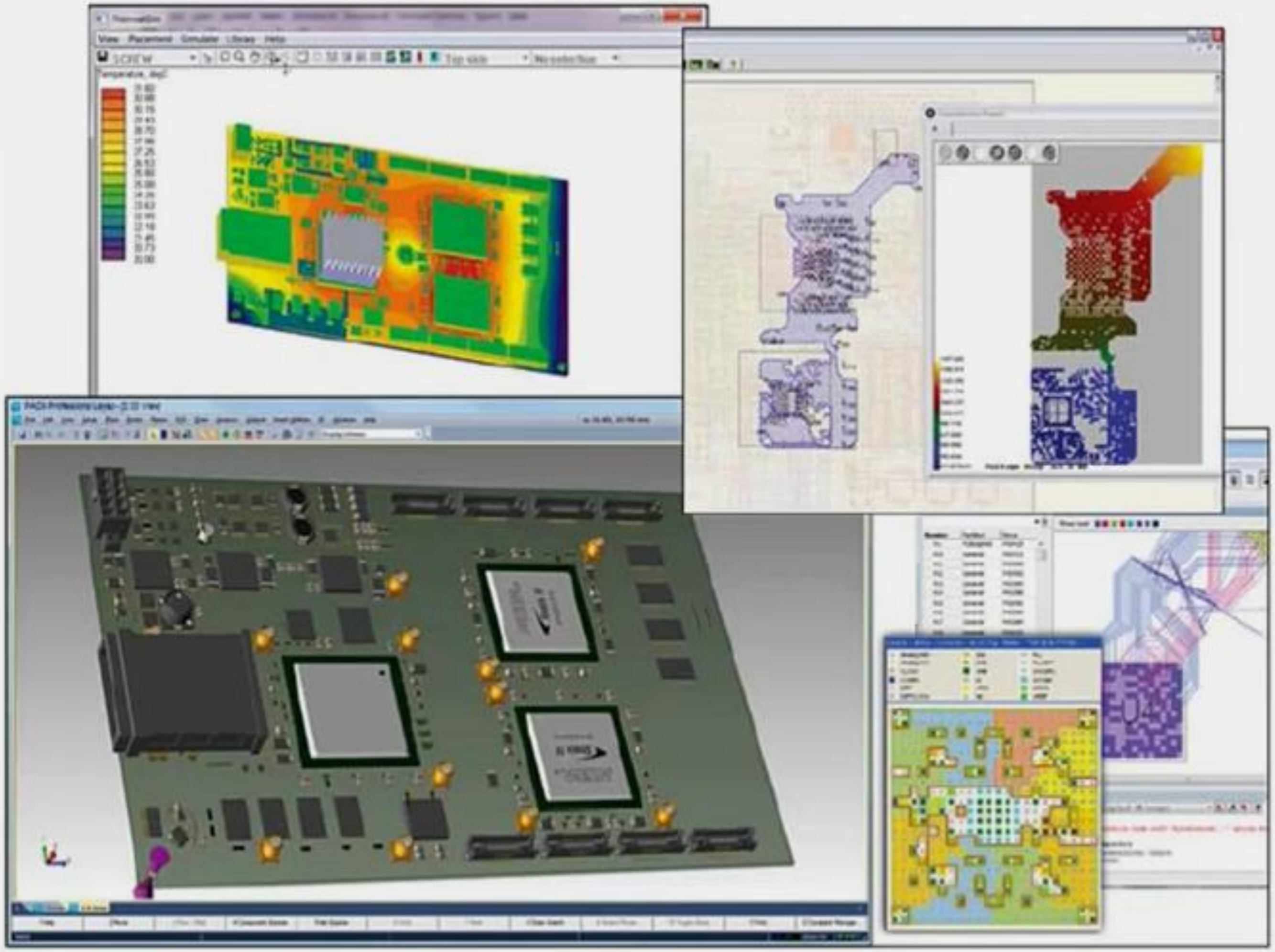
Месторождение высоковязких нефтей







Создание новых электронных систем



- Моделирование электрической схемы
- Моделирование нагрева
- Расчет электромагнитной совместимости
- Расчеты прочности

Обзор курса

1. Элементы теории погрешностей

2. Численные методы решения

задач линейной алгебры

3. Численное интегрирование

4. Интерполяция, аппроксимация функций

5. Приближенное решение нелинейных уравнений

6. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений

Вычисление производной

$$f'(x) = \lim_{dx \to 0} \frac{f(x+dx) - f(x)}{dx}$$

$$\approx \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2} f''(\xi)$$

Теорема 1. Если функция $f(x)$ имеет в точке x_0 производные до n-го порядка включительно, то ее можно представить в виде

$$f(x) = f(x_0) + \frac{f'(x_0)}{1!}(x - x_0) + \cdots + \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}(x - x_0)^n + R_n(x) =$$

$$= \sum_{k=0}^{n} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}(x - x_0)^k + R_n(x),$$

где функция $R_n(x)$ (остаточный член разложения) и ее производные до n-го порядка включительно обращаются в нуль в точке $x = x_0$:

$$R_n(x_0) = R_n'(x_0) = R_n''(x_0) = \cdots = R_n^{(n)}(x_0) = 0.$$

Типы погрешностей

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi)$$

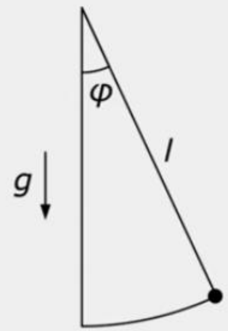
- Ошибки входных данных:

$$f(x+h) \to f(x+h) + \Delta_1, f(x) \to f(x) + \Delta_2$$

- Ошибки метода: $E = \frac{h}{2}f''(\xi)$
- Ошибки машинной арифметики
  - $x, f(x+h), f(x), h$ округляются
  - Вычитание и деление вычисляются неточно

Типы погрешностей

Маятник



- Движение в поле силы тяжести
- Растяжимая нить с весом
- Сопротивление воздуха
- Отклонение на любой угол

$\boldsymbol{\varphi^*}$ **- точное решение**

Модель: математический маятник

$$l\frac{d^2\varphi}{dt^2} + g\sin\varphi + \mu\frac{d\varphi}{dt} = 0$$

$$\varphi(0) = \varphi_0$$

$$\varphi'(0) = \varphi_1$$

- Движение в поле силы тяжести
- **Нерастяжимая нить**
- **Сила сопротивления пропорциональна скорости**
- Отклонение на любой угол
- **Округление начальных данных и параметров задачи**

$\boldsymbol{\varphi_1}$ **- решение модели**

Неустранимая погрешность

$$\Delta_1 = |\varphi^* - \varphi_1|$$

Определение производной
в **непрерывном пространстве**

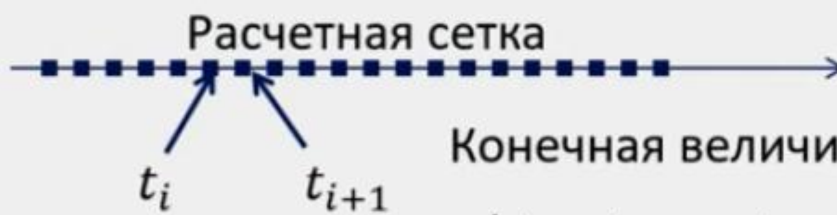
$$\frac{d\varphi}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \frac{\varphi(t + \Delta t) - \varphi(t)}{\Delta t}$$

Бесконечно малая величина

Типы погрешностей

Численная модель

Дискретное пространство



Конечная величина

$$\Delta t = t_{i+1} - t_i$$

$$\varphi_i = \varphi(t_i) \qquad \varphi_{i+1} = \varphi(t_{i+1})$$

Производная

$$\frac{d\varphi}{dt} \approx \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{t_{i+1} - t_i}$$

$\boldsymbol{\varphi_2}$- решение численной модели

Погрешность метода

$\Delta_2 = |\boldsymbol{\varphi_1} - \boldsymbol{\varphi_2}|$

Типы погрешностей

Численная модель

$$\frac{d\varphi}{dt} \approx \frac{\varphi_{i+1} - \varphi_i}{t_{i+1} - t_i}$$

$\boldsymbol{\varphi_2}$**- решение численной модели**

Реализация на конкретном компьютере

IEEE 754 (IEC 60559) – формат представления чисел

float (32 бита)

1	8	23
s	e	f

Double (64 бита)

1	11	52

$$x = (-1)^s \cdot 2^e \sum_{k=1}^{f} \alpha_k 2^{-k}$$

$\boldsymbol{\varphi_3}$**- решение на компьютере**

Погрешность округления

$\Delta_3 = |\boldsymbol{\varphi_2} - \boldsymbol{\varphi_3}|$

Машинное эпсилон – наибольшее положительное число, для которого:

$$1 + \varepsilon = 1$$

При расчетах с **двойной точностью** $\varepsilon \sim 10^{-16}$

В любой математической операции, выполняемой на компьютере, происходит округление

Итоговая погрешность вычислений:

$$\Delta = |\varphi^* - \varphi_3| = |\varphi^* - \varphi_1 + \varphi_1 - \varphi_2 + \varphi_2 - \varphi_3| \leq \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3$$

Определения и свойства

<u>Опр 1</u>: Пусть u и u^*- точное и приближенное значения некоторой величины соответственно. Тогда **абсолютной погрешностью** приближения u^* является Δu^*

$$\Delta u^* = |u - u^*|$$

<u>Опр 2</u>: **Относительной погрешностью** приближения u^* является δu^*

$$\delta u^* = \left|\frac{u - u^*}{u^*}\right|$$

<u>Свойство 1</u>: Абсолютная погрешность суммы или разности равна сумме абсолютных погрешностей

$$\Delta\left(\pm a_1^* \pm a_2^* \pm \ldots \pm a_n^*\right) = \Delta\left(a_1^*\right) + \Delta\left(a_2^*\right) + \ldots + \Delta\left(a_n^*\right)$$

<u>Свойство 2</u>: Относительная погрешность произведения или частного равна сумме относительных погрешностей

$$\delta\left(a_1^* \cdot a_2^* \cdot \ldots \cdot a_n^* \cdot b_1^{*-1} \cdot b_2^{*-1} \cdot \ldots \cdot b_m^{*-1}\right) = \delta\left(a_1^*\right) + \delta\left(a_2^*\right) + \ldots + \delta\left(a_n^*\right) + \delta\left(b_1^*\right) + \delta\left(b_2^*\right) + \ldots + \delta\left(b_m^*\right)$$

Машинная арифметика. Числа с плавающей точкой

степень

$$-0.\underline{31416}\times 10^{1}$$

знак мантисса основание

- Число называется *нормализованным*, если старший разряд мантиссы $\neq 0$.
  - $0.10101_2 \times 2^3$ нормализовано
  - $0.010101_2 \times 2^4$ не нормализовано

Относительная ошибка округления

- $\left|\dfrac{a - a_M}{a_M}\right| \leq ?$
- Округление *до ближайшего машинного числа*
- $a = 0.1\ldots d_p d_{p+1} \ldots \times 2^0$
- $|a - a_M| \leq \dfrac{1}{2} 2^{-p} = 2^{-p-1}$, p – длина мантиссы
- $\left|\dfrac{a - a_M}{a_M}\right| \leq \dfrac{2^{-p-1}}{2^{-1}} \leq 2^{-p} = \epsilon$

Верхнюю границу относительной ошибки ϵ называют *машинным эпсилон*.

IEEE-стандарт. Одинарная точность

Одинарная точность

1	**8**	**23**
знак	показатель	мантисса

- $a = (-1)^s \times 2^{e-127} \times (1+f)$
- $\epsilon = 2^{-24} \approx 6 \times 10^{-8}$
- Диапазон чисел $[10^{-38}, 10^{38}]$

IEEE-стандарт. Двойная точность

Двойная точность

1	**11**	**52**
знак	показатель	мантисса

- $a = (-1)^s \times 2^{e-1023} \times (1+f)$
- $\epsilon = 2^{-53} \approx \times 10^{-16}$
- Диапазон чисел $[10^{-308}, 10^{308}]$

Анализ влияния ошибок округления

- Обозначим $*$ одну из операций $+, -, \times, /$
- $fl(a * b)$ – результат округления $a * b$

Если $a * b$ не выходит за пределы области допустимых показателей, то

$$fl(a * b) = a * b(1 + \delta), \quad |\delta| \le \epsilon$$

- IEEE-арифметика обеспечивает также

$$fl(\sqrt{a}) = \sqrt{a}(1 + \delta), |\delta| \le \epsilon$$

Суммирование ряда Тейлора

Рассмотрим способ вычисления экспоненты, через разложение в ряд Тейлора

$$e^x \approx 1 + x + x^2 + \cdots = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^k}{k!} = S_n$$

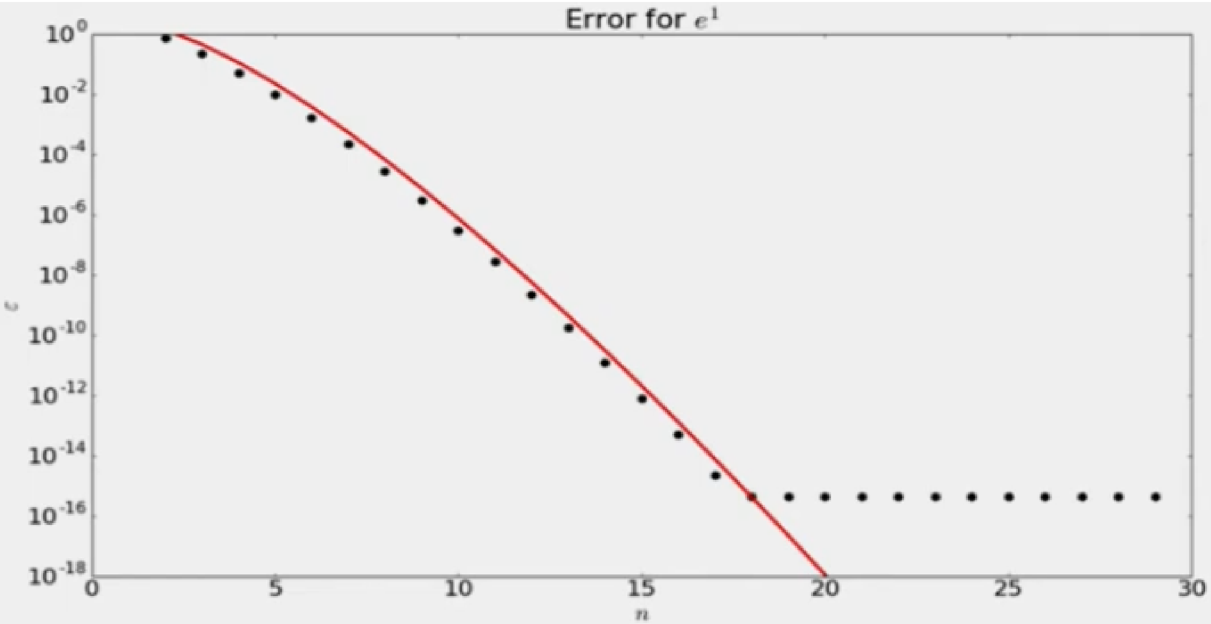
n – параметр метода

Оценим ошибку через формулу Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа

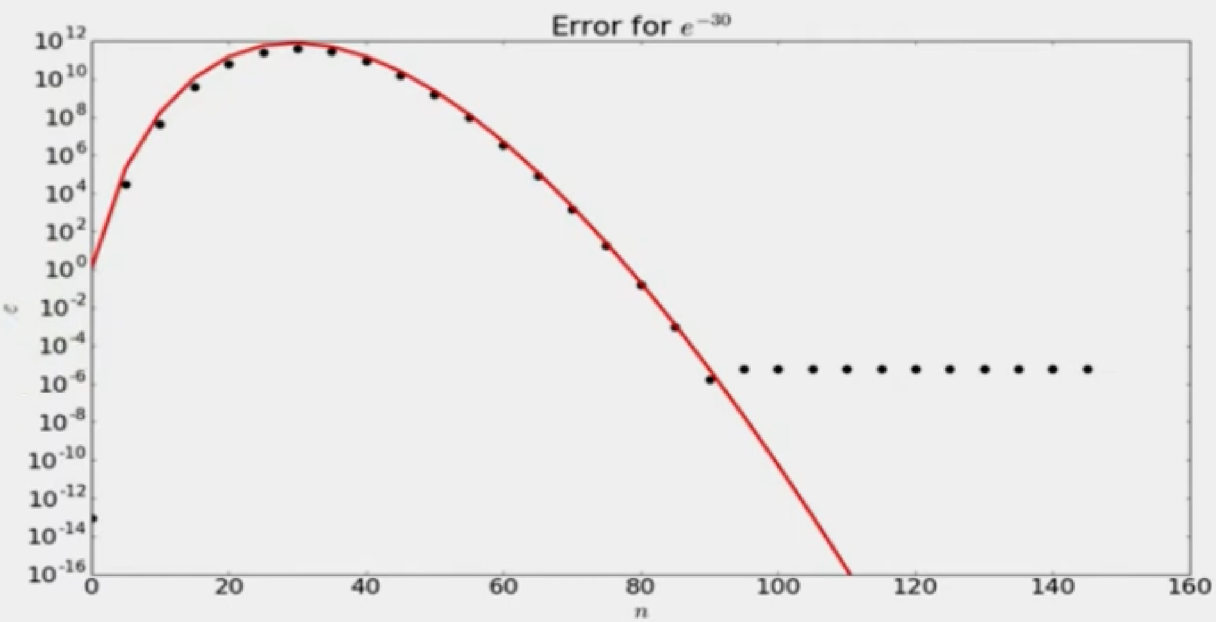
$$e^x \approx 1 + x + x^2 + \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + e^{\xi}\,\frac{|x|^n}{n!}$$

$$|e^x - S_n| \le \max(1, e^{\xi})\,\frac{|x|^n}{n!} \equiv \Delta_{\text{метод}}$$

При $n \to \infty$ ошибка метода стремится к нулю.



Error for e^1
ϵ
n



Error for e^{-30}
ϵ
n

При вычислении $e^{-30} \approx 9.35 \cdot 10^{-14}$ в худшем случае накапливается ошибка

$$\Delta_{\text{вычисл}} = \delta \cdot \sum_{k=0}^{n-1} \frac{|x|^k}{k!} \approx \delta \cdot \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|x|^k}{k!} \approx \delta e^{|x|} \approx 1.1 \cdot 10^{-3}$$

Ошибка превосходит результат на 10 порядков.

Выбор корректного алгоритма

Вычисление $\sin x$ двумя способами в окрестности точки

$$3\pi + \frac{\pi}{4}$$

Разложение в ряд Маклорена $\quad \sin x = \sum_{k=1}^{N} \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{(2k+1)!}$

Разложение в ряд Маклорена с предварительным преобразованием

$$\sin x = \sin\left(\frac{7}{2}\pi - x_1\right) = -\cos x \qquad \sin x = -\sum_{k=0}^{N} \frac{(-1)^k x_1^{2k}}{(2k)!}$$

N	5	10	20	50	100	500
Err1	$-1.78\cdot10^{3}$	24.99	$6.62\cdot10^{-9}$	$2.73\cdot10^{-14}$	$2.73\cdot10^{-14}$	NAN
Err2	$-1.14\cdot10^{-10}$	$2.22\cdot10^{-16}$	$2.22\cdot10^{-16}$	$2.22\cdot10^{-16}$	$2.22\cdot10^{-16}$	$2.22\cdot10^{-16}$

Решение систем линейных уравнений

$$x_1 + 0{,}99x_2 = 1$$
$$0{,}99x_1 + x_2 = 1$$

$$0{,}01(x_1 - x_2) = 0$$

$$x_1 = x_2 = \frac{1}{1{,}99}$$

$$x_1 + 0{,}99x_2 = 0{,}99$$
$$0{,}99x_1 + x_2 = 1{,}01$$

$$x_1 = 0{,}99(1 - x_2)$$

$$0{,}99^2(1 - x_2) + x_2 = 1{,}01$$

$$x_2 = \frac{1{,}01 - 0{,}99^2}{1 - 0{,}99^2} = \frac{0{,}0299}{0{,}01 \cdot 1{,}99} = \frac{2{,}99}{1{,}99}$$

$$x_1 = 0{,}99\left(1 - \frac{2{,}99}{1{,}99}\right) = -\frac{0{,}99}{1{,}99}$$

MAGIC!