Вычислительная математика

Лекция 1

Исупов К. С.
isupov.k@gmail.com

4 сентября 2018 г.

План

1. Введение
   - Историческая справка
   - Факторы успешного решения важных задач с помощью современных ЭВМ
   - Актуальность развития вычислительной математики
   - Этапы решения математических задач
   - Методы решения задач
2. Рабочая программа дисциплины
   - Цель и задачи
   - Модульный план
   - 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 ЭВМ, 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 ЭВМ.
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 ЭВМ, 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

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:

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

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

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

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:

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^6}{7!} + \dots \qquad (3)$$

- 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:

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \ldots \tag{4}$$

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:

$$e^{-5.5} = \frac{1}{e^{5.5}} = \frac{1}{1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \ldots}. \tag{5}$$

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

Итерационные вычисления

Пусть вычисляется рекуррентное соотношение:

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

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

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

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

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