

Предмет вычислительной
математики.

Погрешности вычислений.
Численное дифференцирование.

К.ф.-м.н. Завьялова Наталья Александровна

natalia.zavyalova@gmail.com

- На данный момент все научно-технические задачи решаются с использованием средств вычислительной математики.
- Ни один реальный объект не может быть внедрен в жизнь без соответствующей системы тестов, основанных на математическом моделировании.
- Современные компьютеры и кластерные системы являются самым мощным инструментом исследователя.
- Для эффективного и правильного использования методов математического моделирования необходимо понимать сущность этого инструмента.

Цели и задачи курса

- Познакомить с методами вычислительной математики
- Создать необходимый задел для дальнейшего использования средств моделирования

Что же такое вычислительная математика?

$$ax^2 + bx + c = 0$$

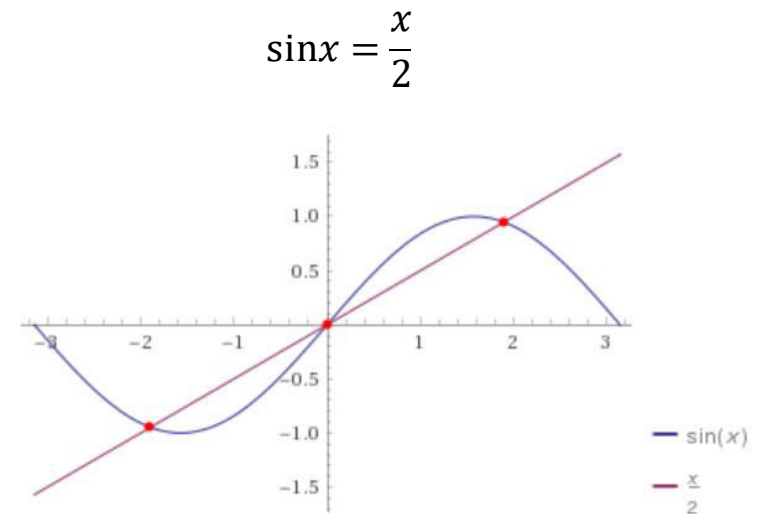
$$D = b^2 - 4ac \quad x_{1,2} = \frac{-b \pm \sqrt{D}}{2a}$$

Кубическое уравнение?

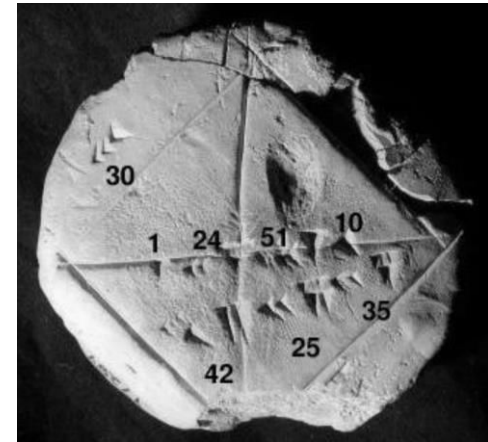
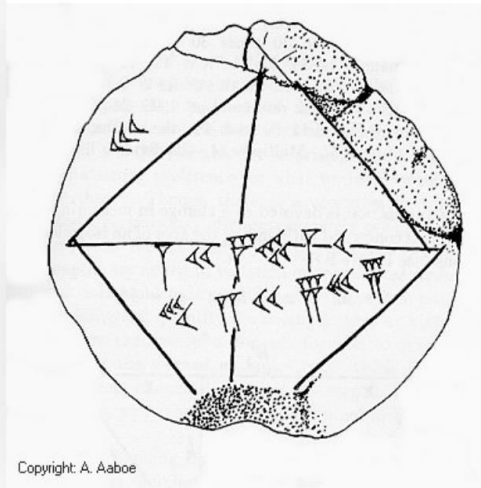
Полином 5-й степени?

...

Вычислительная математика – раздел математики, позволяющий решать на компьютере задачи не имеющие аналитического решения.



1800-1600 гг до н.э.



Вавилонская глиняная табличка примерно 1800—1600 года до н. э. с современными аннотациями. Надписи на табличке дают приближение значения квадратного корня из 2 как суммы четырёх шестидесятеричных чисел

$$\sqrt{2} \approx 1 + \frac{24}{60} + \frac{51}{60^2} + \frac{10}{60^3} \approx 1,41421296$$

Источники численных методов

Иоганн Карл Фридрих Гаусс



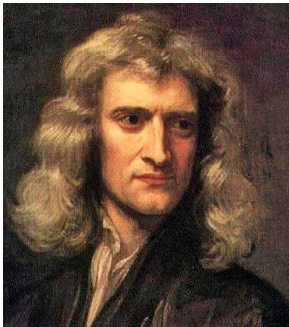
- Решение систем линейных уравнений
- Численное интегрирование

Леонард Эйлер



- Численное решение уравнений в частных производных
- Численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений

Исаак Ньютон



- Численное решение нелинейных уравнений
- Интерполяция данных

Жозеф Луи Лагранж

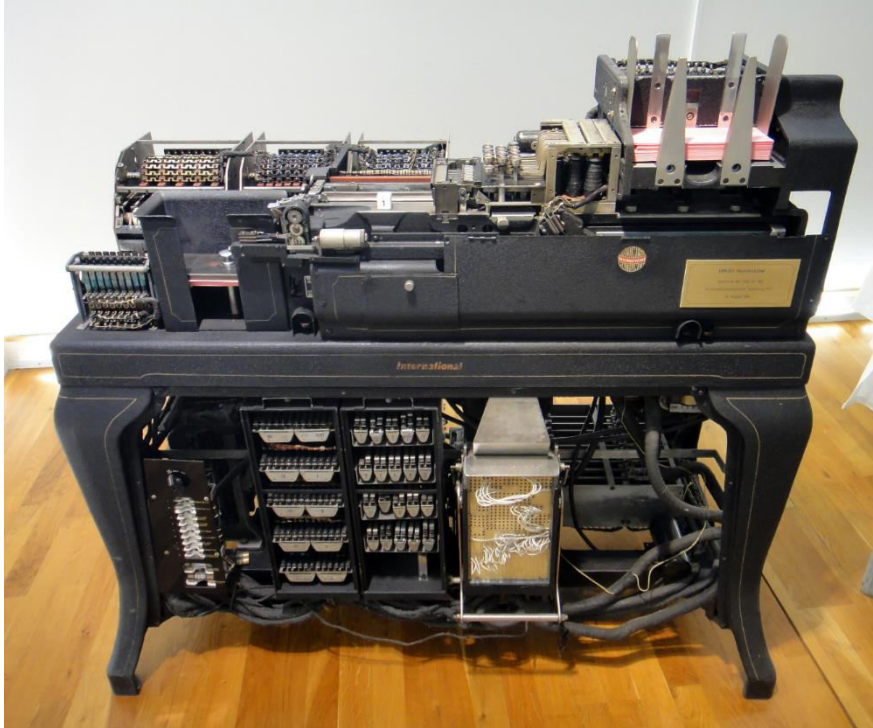


- Интерполяция данных

Манхэттенский проект

Вычислители за работой





IBM 601

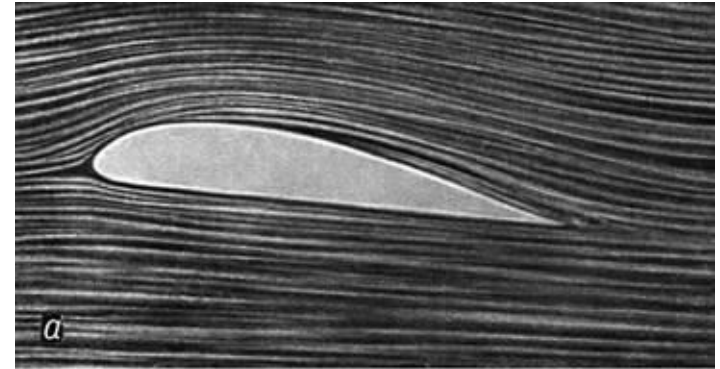
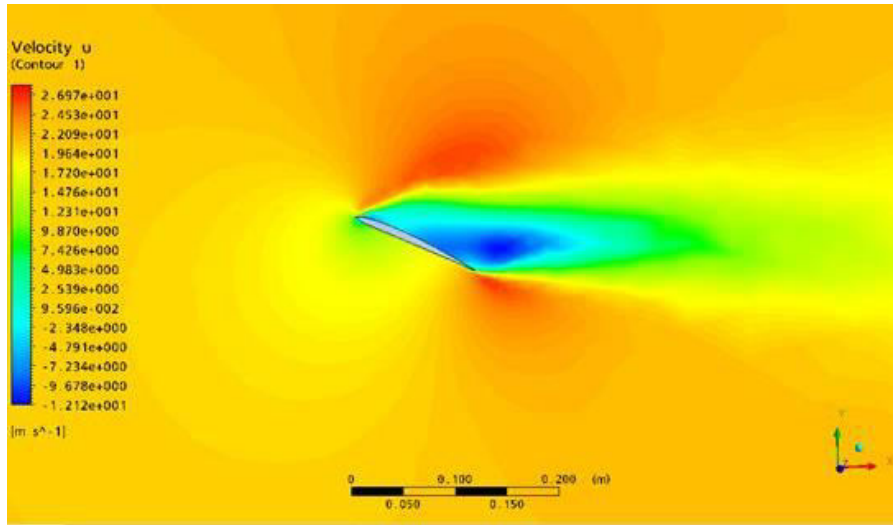
мог прочитать два номера из перфокарты и пробивать произведение в пустом поле на той же карте.

числа могли быть длиной до восьми десятичных цифр.

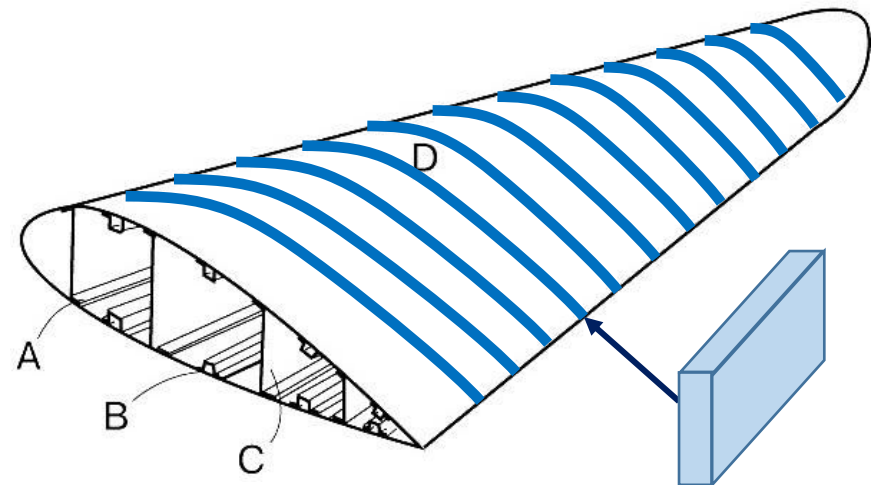
601 был введен в 1931 году и была первой машиной IBM, которая может сделать умножение.

Расчеты аэродинамики

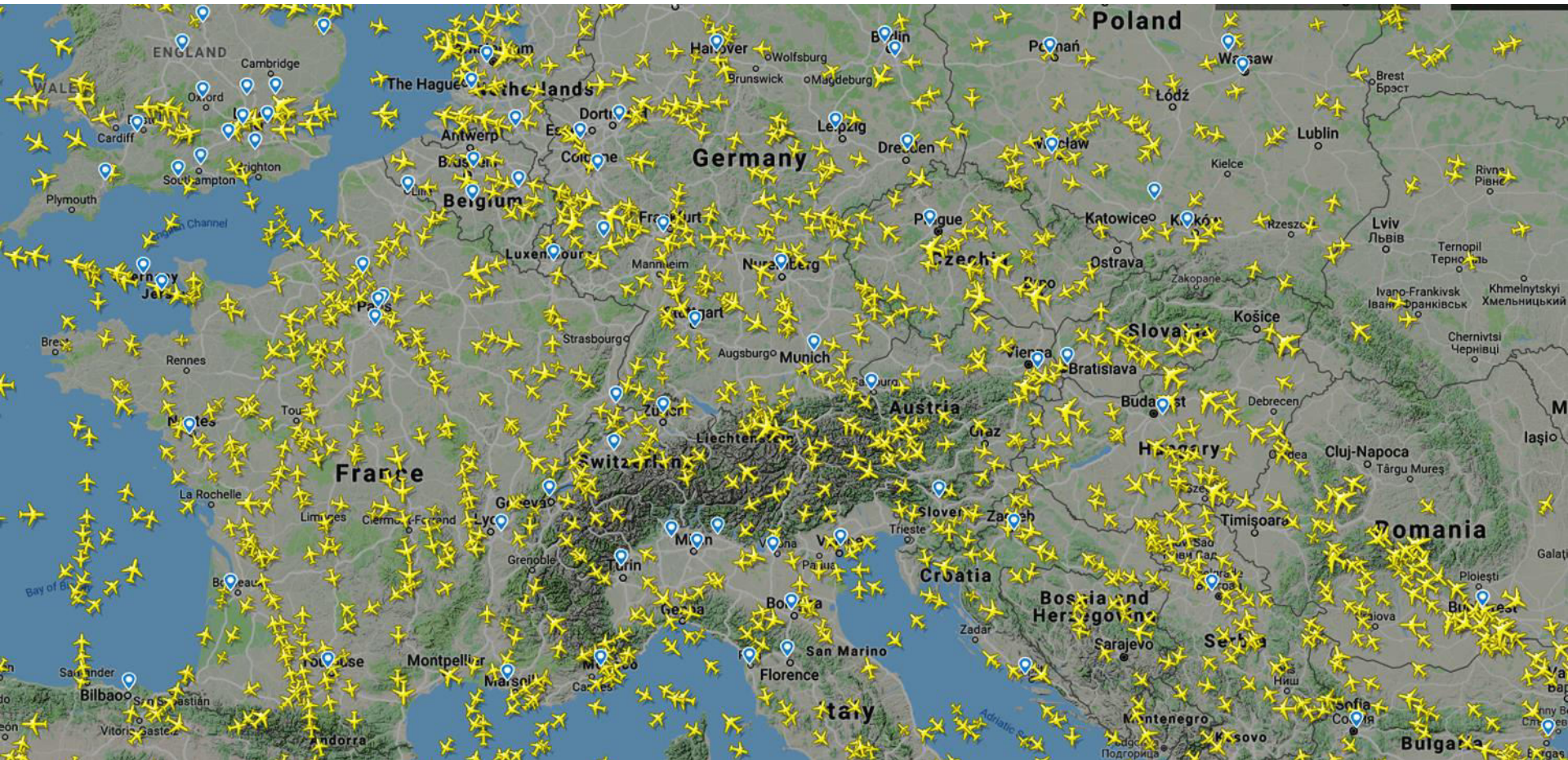
Проблема: формирование вихря на крыле ведет к неустойчивости полета и дополнительным потерям топлива.



Решение: На крыле параллельно наклеиваются специальные полоски. Итоговая экономия топлива составляет 2%.



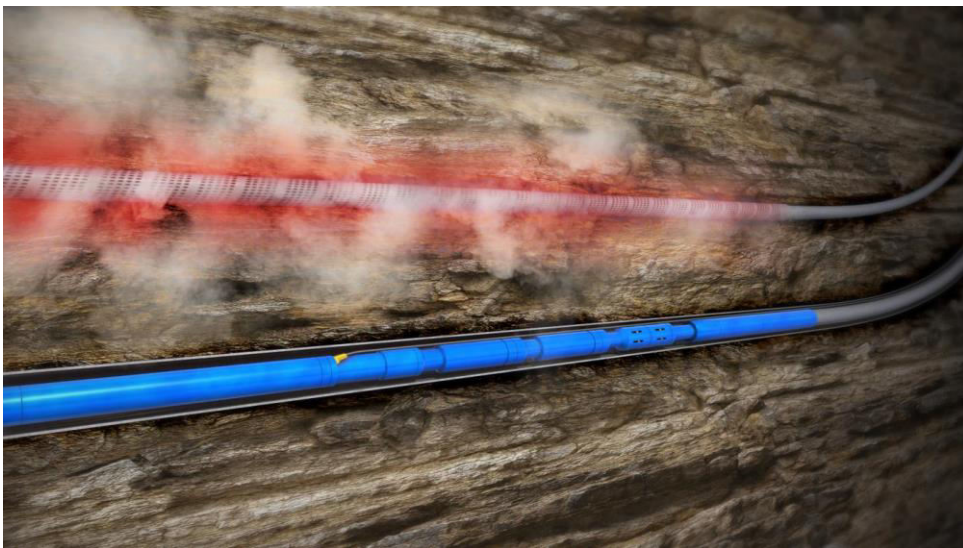
Расчеты аэродинамики



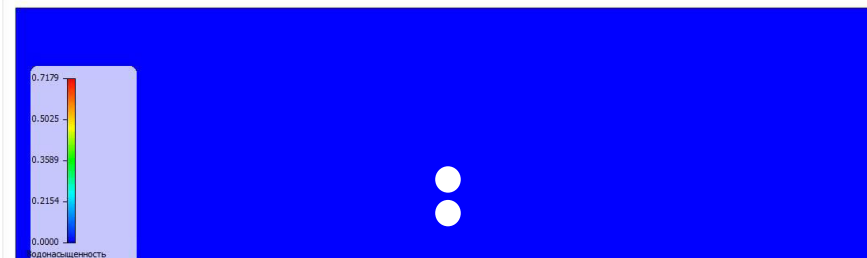
2% в контексте общемировых перелетов приводит к гигантскому экономическому эффекту.

Месторождение высоковязких нефтей

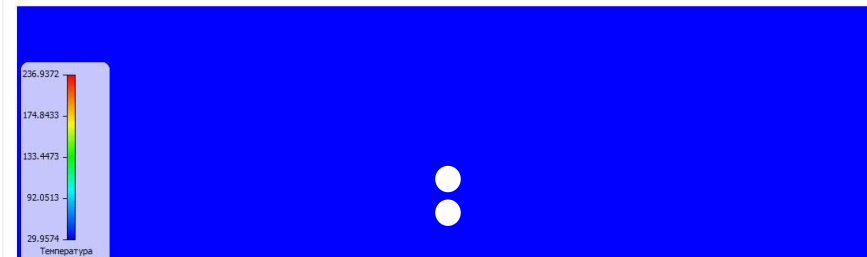
Проблема: На месторождении высоковязких нефтей добыча нефти вообще не соответствовала предварительным оценкам без видимой причины.



Время: 0.00 день



Время: 0.00 день

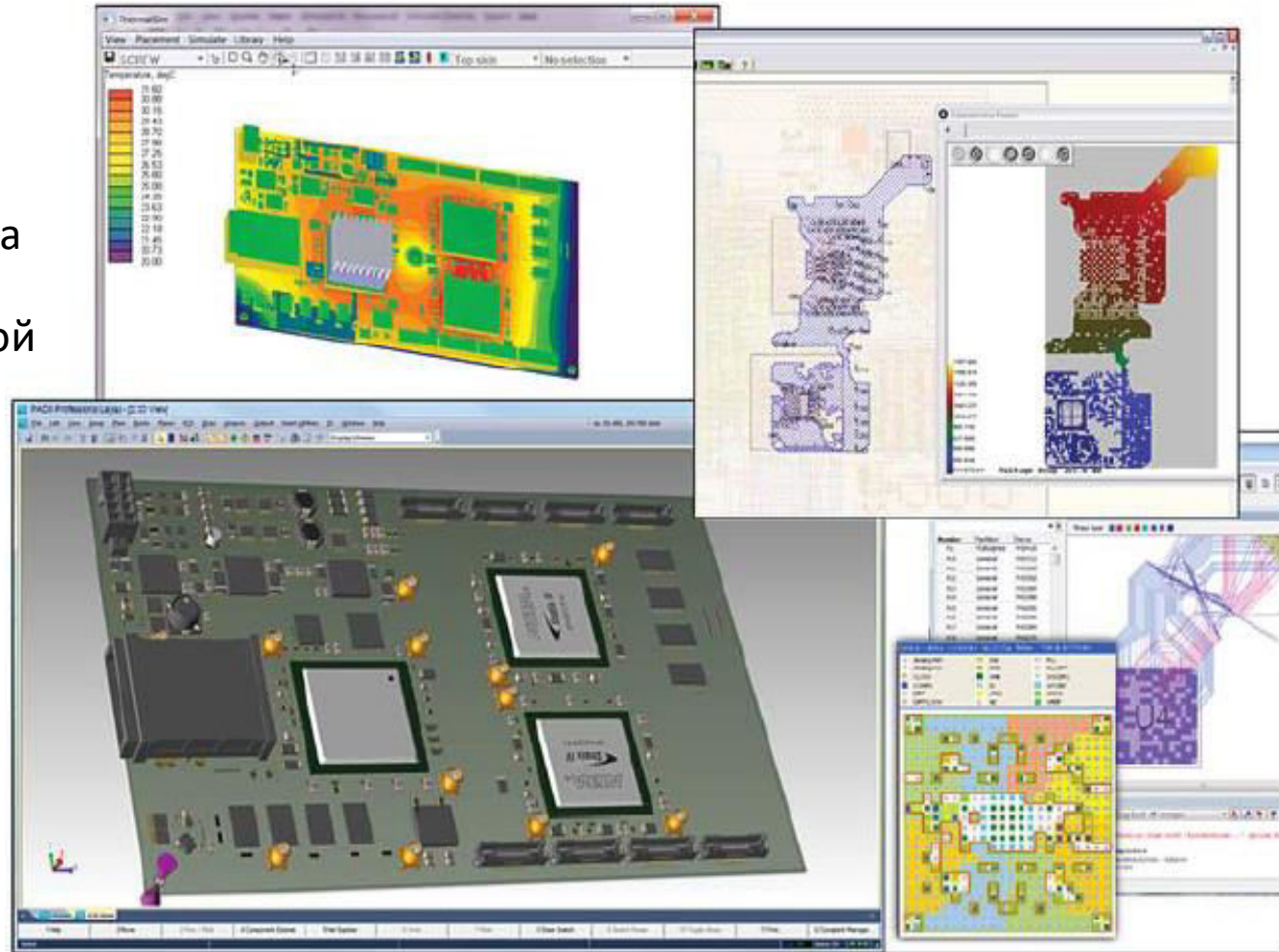


Решение: Было обнаружено, что нефть обладает не Ньютоновской реологией. Эти свойства были заложены в модель, что позволило оценить рентабельность разработки месторождения.

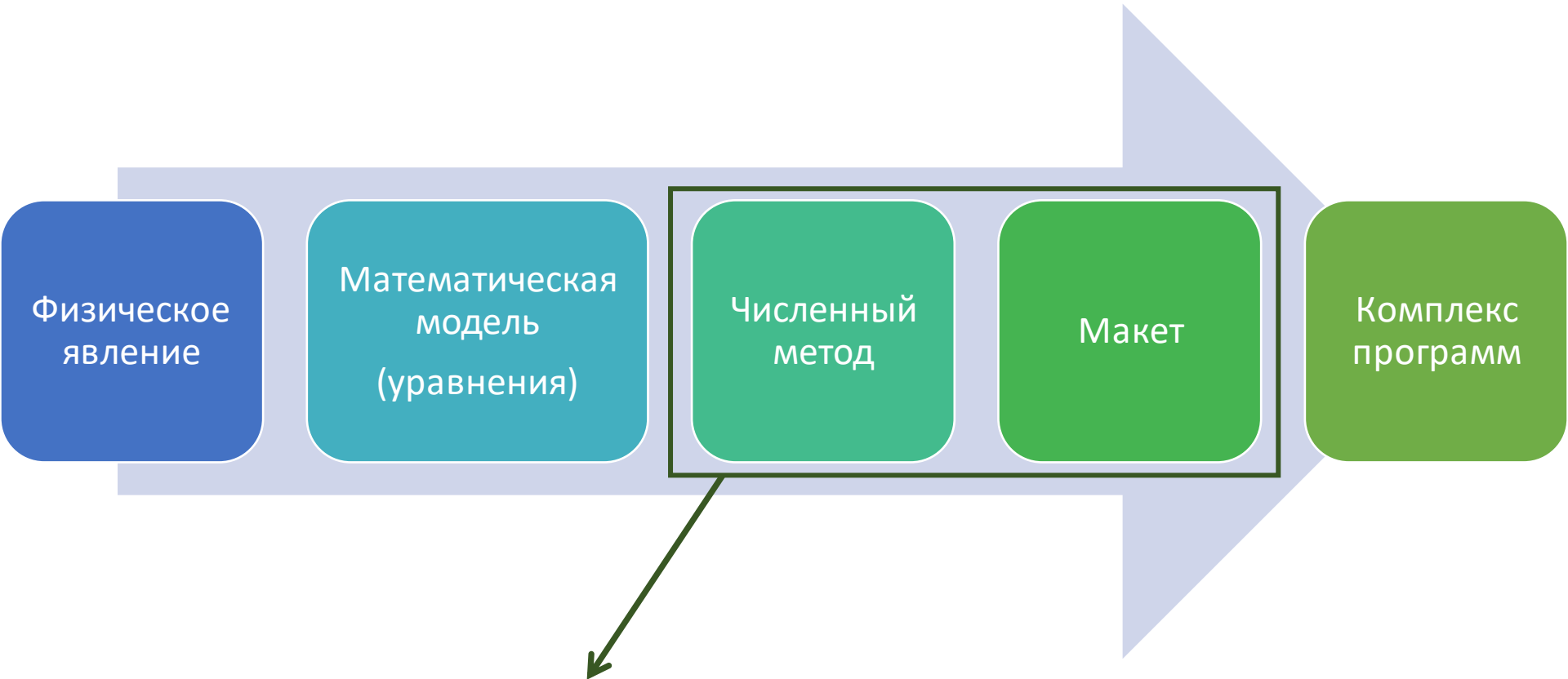
Создание новых электронных систем

Разработка новых электронных систем включает:

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



Организация проекта по моделированию

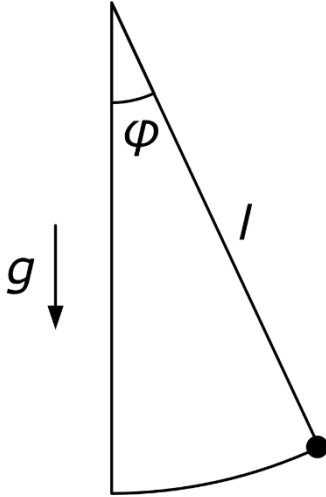


- Погрешности вычислений
- Численное дифференцирование, интегрирование, интерполяция
- Решение нелинейных уравнений
- Решение обыкновенных дифференциальных уравнений
- Решение систем линейных алгебраических уравнений
- Методы для задач в частных производных

Погрешности вычислений

Типы погрешностей

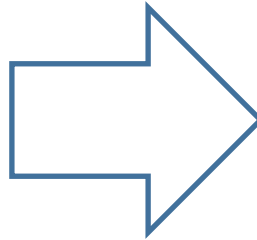
Маятник



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

φ^* - точное решение

Неустраняемая
погрешность



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**

φ_1 - решение модели

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

Типы погрешностей

Модель: математический маятник

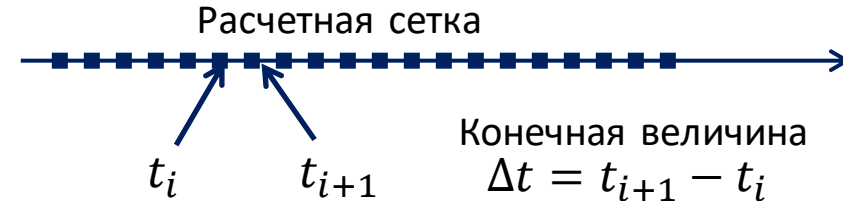
Определение производной
в непрерывном пространстве

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

Бесконечно малая величина

Численная модель

Дискретное пространство



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

Производная

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

φ_2 - решение численной модели

φ_1 - решение модели

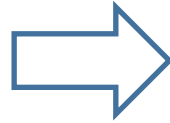
Погрешность
метода

$$\Delta_2 = |\varphi_1 - \varphi_2|$$

Типы погрешностей

Численная модель

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



φ_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
---	----	----

Погрешность
округления

$$\Delta_3 = |\varphi_2 - \varphi_3|$$

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

φ_3 - решение на
компьютере

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:

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

Суммирование ряда Тейлора

Рассмотрим способ вычисления экспоненты, через разложение в ряд Тейлора

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

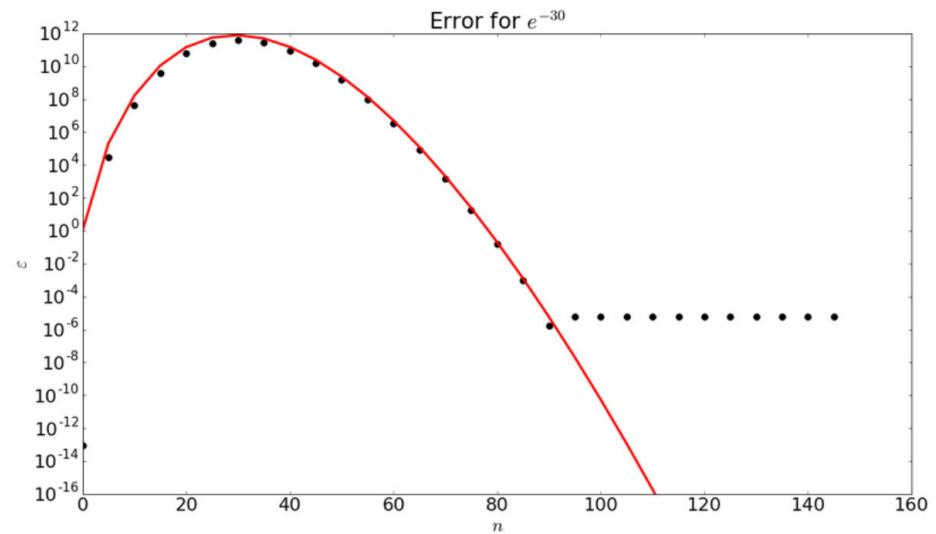
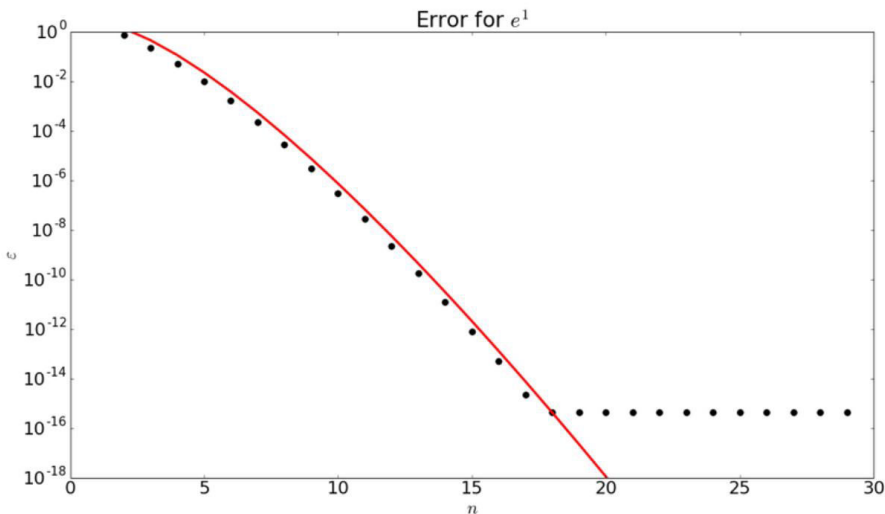
n – параметр метода

Оценим ошибку через формулу Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа

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

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

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



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

$$\sin x = \sum_{k=1}^N \frac{(-1)^k x^{2k+1}}{(2k+1)!}$$

Разложение в ряд Маклорена с предварительным преобразованием

$$\sin x = \sin\left(\frac{7}{2}\pi - x_1\right) = -\cos x_1$$

$$\sin x = -\sum_{k=0}^N \frac{(-1)^k x_1^{2k}}{(2k)!}$$

<i>N</i>	5	10	20	50	100	500
Err1	-1.78·10 ³	24.99	6.62·10 ⁻⁹	2.73·10 ⁻¹⁴	2.73·10 ⁻¹⁴	NAN
Err2	-1.14·10 ⁻¹⁰	2.22·10 ⁻¹⁶	2.22·10 ⁻¹⁶	2.22·10 ⁻¹⁶	2.22·10 ⁻¹⁶	2.22·10 ⁻¹⁶

Решение систем линейных уравнений

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

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



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



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

$$x_1 + 0,99x_2 = 0,99$$

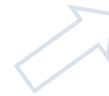
$$0,99x_1 + x_2 = 1,01$$



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



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



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

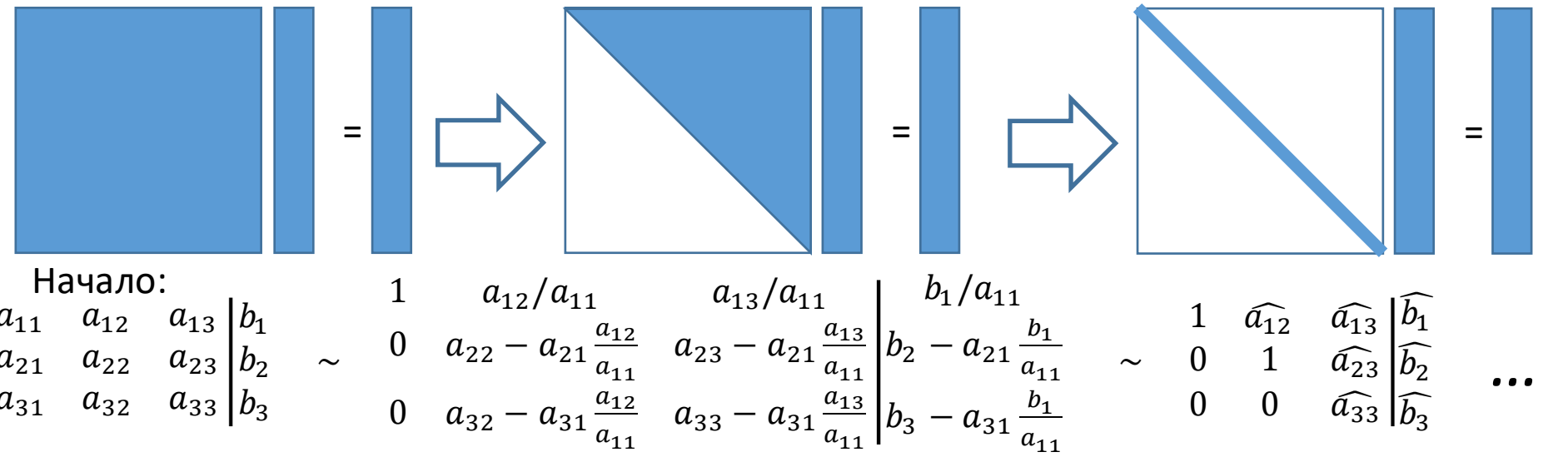
$$x_1 = 0,99 \left(1 - \frac{2,99}{1,99} \right) = -\frac{0,99}{1,99}$$



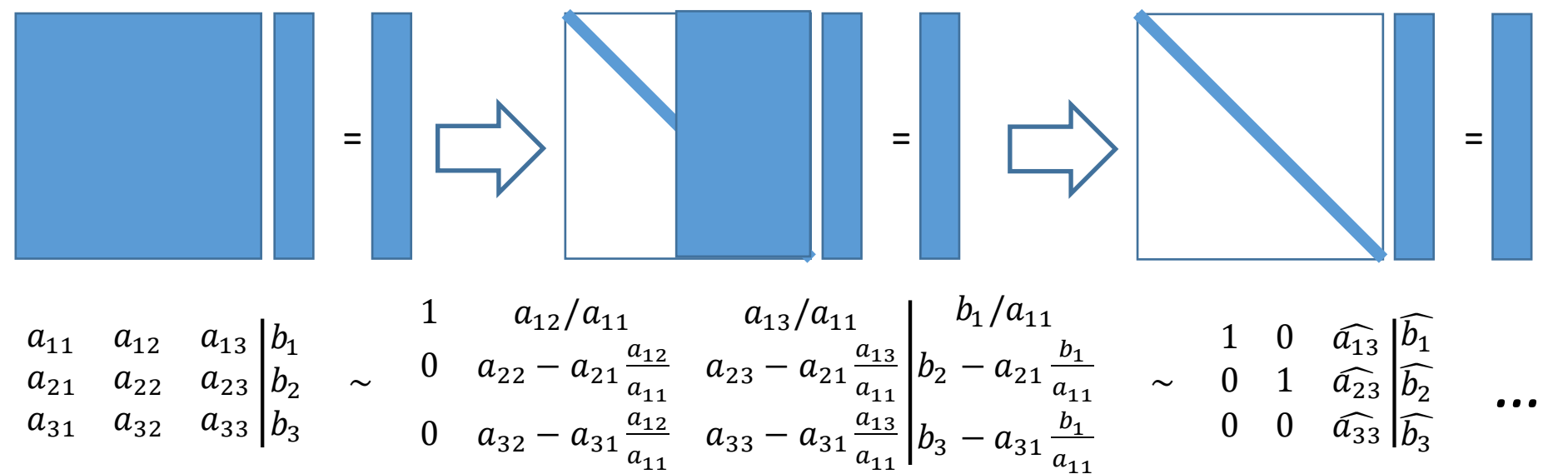
MAGIC!

Алгоритм вычисления решения системы уравнений

Метод Гаусса



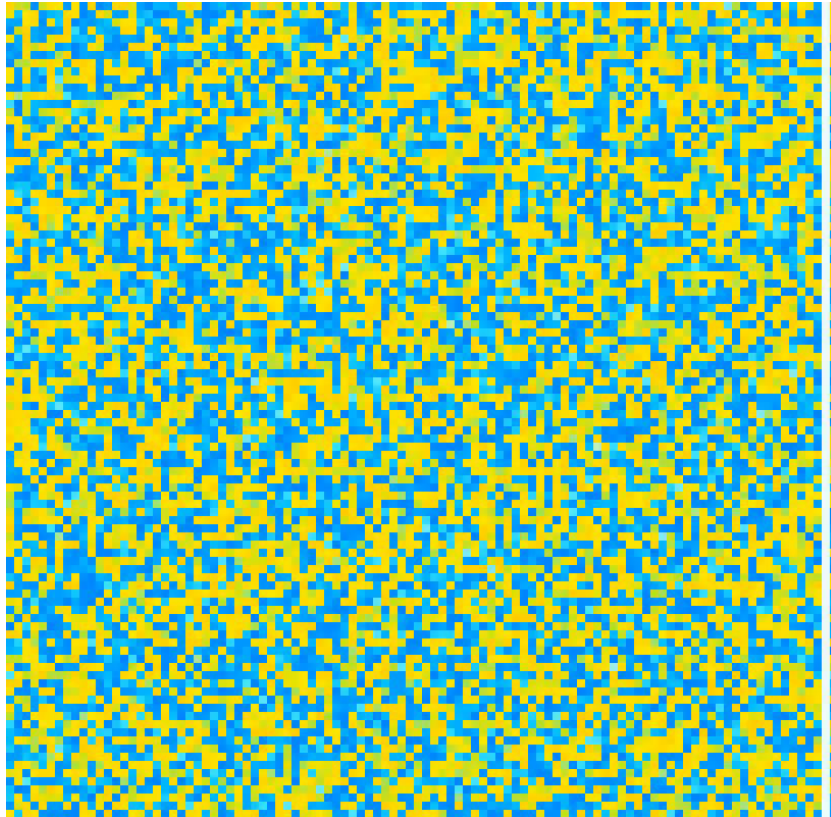
Метод Гаусса-Жордана (с выбором главного элемента)



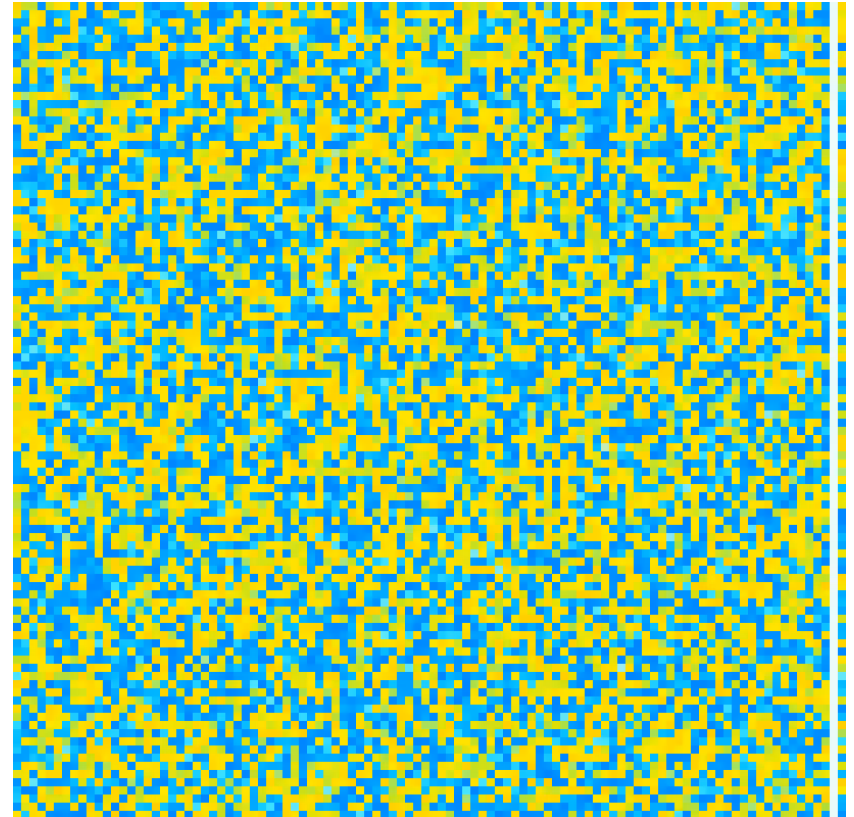
Алгоритм вычисления решения системы уравнений

Для теста использовалась матрица 100×100 заполненная рандомно значениями из отрезка $[-1, 1]$.

Метод Гаусса



Метод Гаусса-Жордана с выбором главного элемента



Для такого теста точность вычислений, обусловленная погрешностями округления, отличия на 4 порядка

Определения и свойства

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

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

Опр 2: **Относительной погрешностью** приближения u^* является δu^*

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

Свойство 1: Абсолютная погрешность суммы или разности равна сумме абсолютных погрешностей

$$\Delta(\pm a_1^* \pm a_2^* \pm \dots \pm a_n^*) = \Delta(a_1^*) + \Delta(a_2^*) + \dots + \Delta(a_n^*)$$

Свойство 2: Относительная погрешность произведения или частного равна сумме относительных погрешностей

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

Численное дифференцирование

Вычисление первой производной

Пространство непрерывных функций

x - непрерывная область определения функции

$f(x)$ - непрерывная область определения функции

$$\frac{df}{dx} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x}$$

Пространство дискретных функций

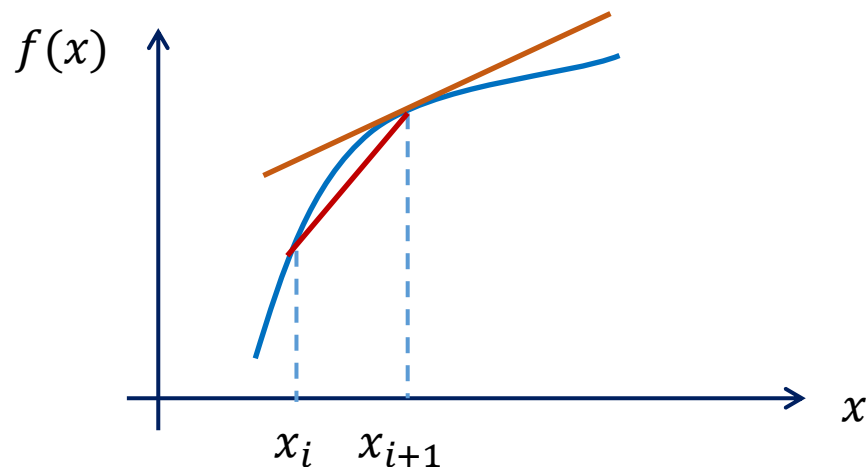
$\{x\}_{i=0}^N$ - набор точек- расчетная сетка

$x_{i+1} - x_i = h$ - шаг сетки

$x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$ - равномерная сетка

$f(x_i) = f_i$ - сеточная функция

$$\frac{df}{dx_{\text{числ}}} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$



Погрешность приближенного дифференцирования

Считается, что функция $f(x)$ нужное число раз непрерывно дифференцируемы

$$\frac{df}{dx_{\text{числ}}} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

Для оценки погрешности воспользуемся разложением в ряд Тейлора

$$f_{i+1} = f(x_{i+1}) = f(x_i + h) = f_i + f_i' h + f_i'' \frac{h^2}{2!} + O(h^3)$$

Замечание: Используется именно $O(h^3)$, т.к. это позволяет зафиксировать порядок малости метода.

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{o(x)}{x} = 0$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{O(x)}{x} = \text{const}$$

Главный член погрешности

Метод **первого** порядка аппроксимации

$$\frac{df}{dx_{\text{числ}}} = \frac{f_i + f_i' h + f_i'' \frac{h^2}{2!} + O(h^3) - f_i}{h} = f_i' + \underbrace{f_i'' \frac{h}{2!} + O(h^2)}_{\text{Погрешность метода}}$$

Точное значение производной

$$\Delta_{\text{метод}} \leq \frac{h}{2} \max |f_i''|$$
$$\Delta_{\text{метод}} \leq \frac{h}{2} M_2$$

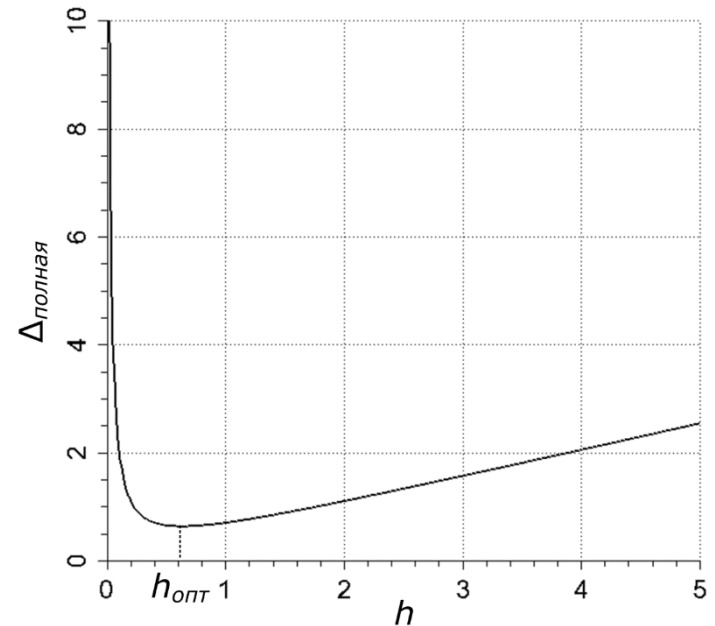
Полная погрешность при дифференцировании

Пусть $f(x_i)$ вычисляется с неустранимой погрешностью $\delta \quad \forall i$

$$\frac{df}{dx}_{\text{числ}} = \frac{f_{i+1} \pm \delta - f_i \pm \delta}{h} \quad \Rightarrow \quad \Delta_{\text{неустр}} = \frac{2\delta}{h}$$

$$\Delta_{\text{полная}} = \Delta_{\text{метода}} + \Delta_{\text{неустр}} = \frac{h}{2} M_2 + \frac{2\delta}{h}$$

Следовательно, существует значение шага h при котором погрешность минимальна



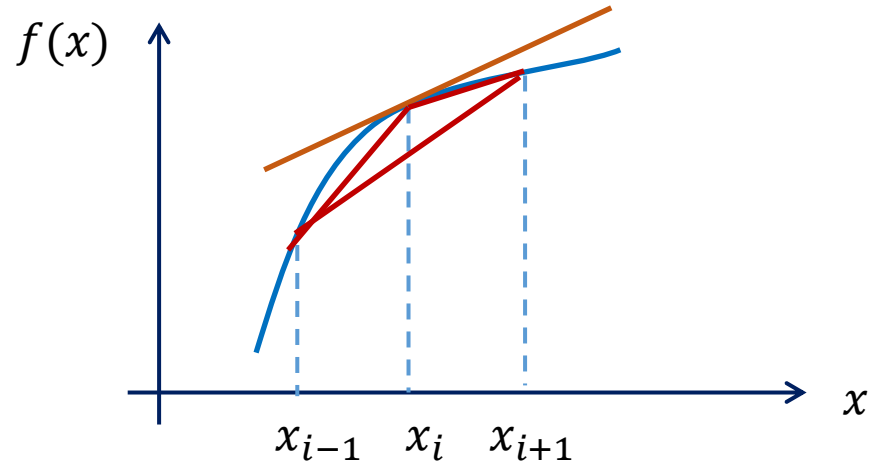
$$(\Delta_{\text{полная}})'_h = \frac{1}{2} M_2 - \frac{2\delta}{h^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad h_{\text{опт}} = 2 \sqrt{\frac{\delta}{M_2}}$$

Оптимальный шаг численного дифференцирования

Другие формулы численного дифференцирования

$$\frac{df}{dx}_{\text{числ2}} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h}$$

$$\frac{df}{dx}_{\text{числ3}} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$$

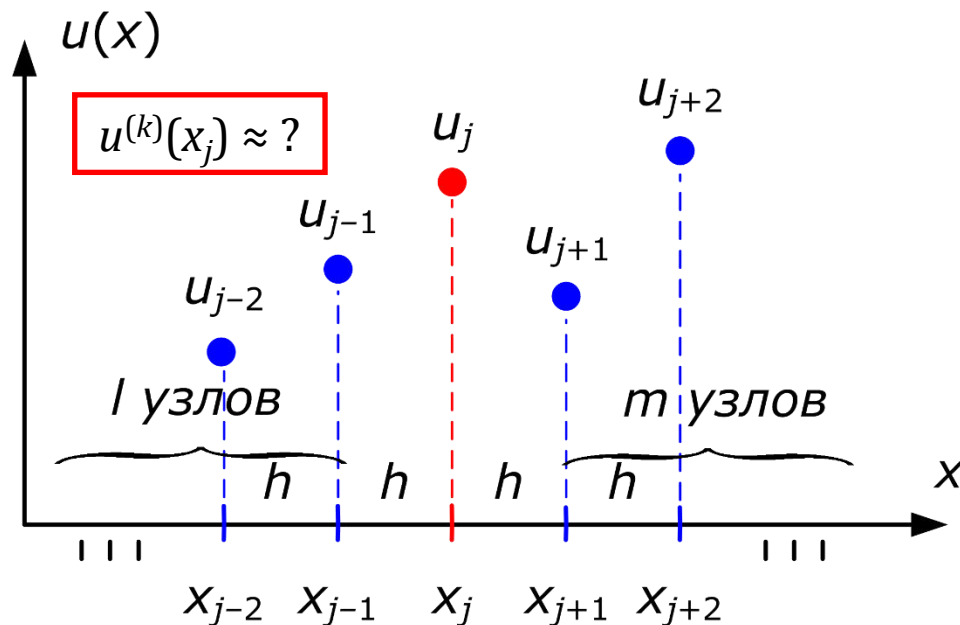


$$f_{i\pm 1} = f(x_{i\pm 1}) = f(x_i \pm h) = f_i \pm f'_i h + f''_i \frac{h^2}{2!} \pm f'''_i \frac{h^3}{3!} + O(h^3)$$

$$\frac{df}{dx}_{\text{числ2}} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} = \frac{f_i - (f_i - f'_i h + f''_i \frac{h^2}{2!} + O(h^3))}{h} = f'_i + f''_i \frac{h}{2!} + O(h^2)) \quad \text{I порядок}$$

$$\begin{aligned} \frac{df}{dx}_{\text{числ3}} &= \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = \frac{(f_i + f'_i h + f''_i \frac{h^2}{2!} + f'''_i \frac{h^3}{3!} - (f_i - f'_i h + f''_i \frac{h^2}{2!} - f'''_i \frac{h^3}{3!} + O(h^3)))}{2h} \\ &= f'_i + f'''_i \frac{h^2}{6} + O(h^3)) \quad \text{II порядок} \end{aligned}$$

Метод неопределенных коэффициентов



Метод неопределенных
коэффициентов:

$$u^{(k)}(x_j) \approx \frac{1}{h^k} \sum_{i=-l}^m \alpha_i u(x_j + ih)$$

Для простоты рассмотрим случай поиска первой производной: $k = 1$

$$u_{j+i} = u(x_j + ih) = u(x_j) + u' \cdot (ih) + u'' \cdot \frac{(ih)^2}{2!} + u''' \cdot \frac{(ih)^3}{6} + \dots + u^{(n)} \cdot \frac{(ih)^n}{n!} + \dots$$

Производные в точке x_j

Тогда

$$u'_j = \frac{1}{h} u_j \sum_{i=-l}^m \alpha_i + u'_j \sum_{i=-l}^m i \alpha_i + \frac{h^2}{2} u''_j \sum_{i=-l}^m i^2 \alpha_i + \frac{h^3}{6} u'''_j \sum_{i=-l}^m i^3 \alpha_i + \dots$$

Метод неопределенных коэффициентов

$$\underbrace{0 \cdot u_j}_{\text{red}} + \underbrace{1 \cdot u'_j}_{\text{yellow}} + \underbrace{0 \cdot u''_j}_{\text{green}} + \underbrace{0 \cdot u'''_j}_{\text{blue}} = \frac{1}{h} u_j \underbrace{\sum_{i=-l}^m \alpha_i}_{\text{red}} + u'_j \underbrace{\sum_{i=-l}^m i \alpha_i}_{\text{yellow}} + \frac{h^2}{2} u''_j \underbrace{\sum_{i=-l}^m i^2 \alpha_i}_{\text{green}} + \frac{h^3}{6} u'''_j \underbrace{\sum_{i=-l}^m i^3 \alpha_i}_{\text{blue}}$$

Приравниваем коэффициенты при соответствующих степенях производных

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = \sum_{i=-l}^m \alpha_i \\ 1 = \sum_{i=-l}^m i \alpha_i \\ 0 = \sum_{i=-l}^m i^2 \alpha_i \\ 0 = \sum_{i=-l}^m i^3 \alpha_i \\ \vdots \end{array} \right.$$

В результате получается система для нахождения коэффициентов $\{\alpha_i\}$

Число неизвестных равно числу уравнения при условии
 $n = l + m$

Остаточный член имеет n -й порядок аппроксимации

Разрешимость полученной системы уравнений

Решаем систему $\mathbf{A}\alpha = \mathbf{b}$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ -l & -l+1 & -l+2 & -l+3 & \dots & m \\ -l^2 & (-l+1)^2 & (-l+2)^2 & (-l+3)^2 & \dots & m^2 \\ -l^3 & (-l+1)^3 & (-l+2)^3 & (-l+3)^3 & \dots & m^3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ -l^n & (-l+1)^n & (-l+2)^n & (-l+3)^n & \dots & m^n \end{pmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}$$

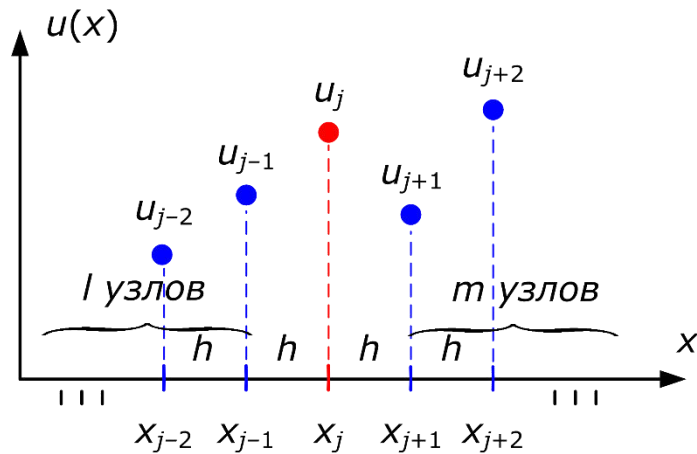
Определитель матрицы \mathbf{A} – детерминант Вандермонда. В случаях различия всех узлов Шаблона $\det \mathbf{A} \neq 0$ и, значит, существует единственное решение системы – набор коэффициентов.

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & \dots & x_2^{n-1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & x_n & \dots & x_n^{n-1} \end{vmatrix} = \prod_{1 \leq j < i \leq n} (x_i - x_j) = 0$$

\Leftrightarrow

существует пара $(x_i, x_j): x_i = x_j, i \neq j$

Замечания



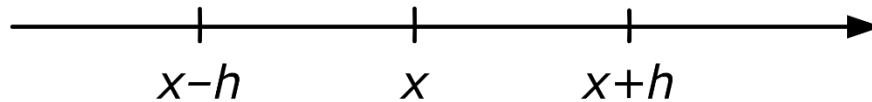
На шаблоне из N точек с помощью метода неопределенных коэффициентов всегда можно построить единственную формулу для вычисления производной k -го порядка (k от 1 до $N - 1$) с точностью по крайней мере $O(h^{N-k})$.

При симметричном расположении узлов относительно x_j , т.е. $m = l$, и четных k порядок формул численного дифференцирования увеличивается на 1 по сравнению с общим случаем. При этом $\alpha_i = \alpha_{-i}$.

При нечетных k дополнительного порядка не будет, но справедливо $\alpha_i = -\alpha_{-i}$, $\alpha_i = 0$

Использование метода неопределенных коэффициентов

Построить на 3-х точках расчетной сетки формулы вычисления первой и второй производной с максимально возможным порядком точности



$$u'(x) \approx ?$$

$$u''(x) \approx ?$$

$$u(x+h) = u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) + \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x) + O(h^4)$$

$$u(x-h) = u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2}u''(x) - \frac{h^3}{6}u^{(3)}(x) + O(h^4)$$

$$u'_{h\bar{\alpha}}(x) = \frac{1}{h}(\alpha'_1 u(x+h) + \alpha'_0 u(x) + \alpha'_{-1} u(x-h))$$

$$u''_{h\bar{\alpha}}(x) = \frac{1}{h^2}(\alpha''_1 u(x+h) + \alpha''_0 u(x) + \alpha''_{-1} u(x-h))$$

Первая производная

$$u'_{h\bar{\alpha}}(x) = \frac{1}{h} \left(\alpha'_1 \left[u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) + \frac{h^3}{6} u^{(3)}(x) \right] + \right. \\ \left. + \alpha'_0 u(x) + \alpha'_{-1} \left[u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) - \frac{h^3}{6} u^{(3)}(x) \right] \right) + O(h^3)$$

$$\begin{cases} \alpha'_1 + \alpha'_0 + \alpha'_{-1} = 0 \\ \alpha'_1 - \alpha'_{-1} = 1 \\ \alpha'_1 + \alpha'_{-1} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha'_{-1} = -1/2 \\ \alpha'_0 = 0 \\ \alpha'_1 = 1/2 \end{cases}$$

$$u'(x) = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h} + O(h^2)$$

Вторая производная

$$u''_{h\bar{\alpha}}(x) = \frac{1}{h^2} \left(\alpha''_1 \left[u(x) + hu'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) + \frac{h^3}{6} u^{(3)}(x) \right] + \right. \\ \left. + \alpha''_0 u(x) + \alpha''_{-1} \left[u(x) - hu'(x) + \frac{h^2}{2} u''(x) - \frac{h^3}{6} u^{(3)}(x) \right] \right) + O(h^2)$$

$$\begin{cases} \alpha''_1 + \alpha''_0 + \alpha''_{-1} = 0 \\ \alpha''_1 - \alpha''_{-1} = 0 \\ \alpha''_1 + \alpha''_{-1} = 2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha''_{-1} = 1 \\ \alpha''_0 = -2 \\ \alpha''_1 = 1 \end{cases}$$

$$u''(x) = \frac{u(x+h) - 2u(x) + u(x-h)}{h^2} + O(h^2)$$

Выводы из Лекции № 1

1. Рассмотрены основные особенности предмета вычислительной математики.
2. Классифицированы погрешности и проанализированы основные причины их возникновения в расчетах.
3. Сформулирована задача численного дифференцирования и продемонстрирован способ построения формул численного дифференцирования методом неопределенных коэффициентов. Построены формулы для аппроксимации 1-ой и 2-ой производных на симметричном 3-х точечном шаблоне с максимальным порядком.

При подготовке лекции использовались

1. Петров И.Б., Лобанов А.И. Лекции по вычислительной математике: учеб. пособие. – М.: Интернет-Университет Информационных Технологий. Бином. Лаборатория знаний, 2006. – С. 16 – 28.
2. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2008. – С. 8 – 20.
3. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику: учеб. пособие. – М.: Изд-во МФТИ, 1994. – С. 24 – 25.

Спасибо за внимание!

Критерии оценки работы за семестр

- 1-ая контрольная работа (задание) - 0.25
- 2-ая контрольная работа (задание) - 0.25
- Программы по 1-ому заданию - 0.2
- Программы по 2-ому заданию - 0.2
- Посещаемость семинаров - 0.1

Дополнительно

- Практическая работа 1 – 0.1
- Практическая работа 2 – 0.1