Лекция № 1

Вычислительная математика

Введение

"Математика - это то, посредством чего люди управляют природой и собой".

Академик А. Н. Колмогоров

Она, по существу, сегодня служит для науки и техники своеобразным инструментом.

Академик А. Н. Крылов, известный математик, когда-то сказал: "Это есть инструмент такой же, как штангель, зубило, ручник, напильник для слесаря или полусаженок, топор и пила для плотника".

Еще недавно - всего лет 50 назад - нельзя было и думать, чтобы за обозримый промежуток времени рассчитать различные варианты движения космических кораблей, работы атомных реакторов, течение газовых струй в сверхбыстрых потоках, нельзя было провести расчеты внутриатомных сил или ядерных ускорителей.

Теперь подобные расчеты не смущают ученых. Старинную науку математику обогатили и новыми методами, и новыми средствами.

Лишь один пример. Математик Шенкс в свое время потратил жизнь на то, чтобы вычислить число π с точностью до 707 десятичных знаков. Такой результат получил славу рекорда вычислений XIX века. Недаром на могиле математика лежит плита без единой надписи - на ней изображен только знак π. Теперь же счетная машина довольно быстро вычисляет это число с точностью до 2035 десятичных знаков!

Благодаря вычислительной технике большое развитие получила вычислительная математика, и математические абстракции стали входить в повседневную жизнь.

Родившись из запросов практики, вычислительная математика теперь сама влияет на развитие теории. Требует от теории новых эффективных методов, принципиально отличных от прежних.

Вычислительная математика сегодня разрабатывает правила численного расчета различных математических задач, оценивает сложность, трудоемкость и точность алгоритмов и методы их программирования на вычислительных машинах. Эта работа чрезвычайно сложная. Есть алгоритмы, содержащие до миллиарда и более арифметических операций.

Вычислительная математика помогает не только традиционным своим подопечным - механике, физике, астрономии, - но и таким, казалось бы, далеким от нее разделам науки, как геология, медицина, лингвистика, экономика.

Вычислительная математика (calculus mathematics) - раздел математики, включающий круг вопросов, связанных с производством вычислений и использованием ЭВМ. В более узком понимании ВМ – это теория численных методов решения типовых математических задач.

После того, как математическая модель составлена, переходят к *постановке вычислительной задачи.* При этом устанавливают, какие характеристики математической модели являются *исходными (входными) данными,* какие - *параметрами модели,* а какие - *выходными данными*. Проводится анализ полученной задачи с точки зрения существования и единственности решения.
На следующем этапе выбирается *метод* решения задачи. Во многих конкретных случаях найти решение задачи в явном виде не представляется возможным, так как оно не выражается через элементарные функции. Такие задачи можно решить лишь приближенно.
Под *вычислительными (численными) методами* подразумеваются приближенные процедуры, позволяющие получать решение в виде конкретных числовых значений.

Вычислительные методы, как правило, реализуются на ЭВМ. Для решения одной и той же задачи могут быть использованы различные вычислительные методы, поэтому нужно уметь оценивать качество различных методов и эффективность их применения для данной задачи.

Затем для реализации выбранного вычислительного метода составляется *алгоритм и программа для ЭВМ.* Современному инженеру важно уметь преобразовать задачу к виду, удобному для реализации на ЭВМ и построить алгоритм решения такой задачи.

В настоящее время на рынке программного обеспечения широко представлены как пакеты, реализующие наиболее общие методы решения широкого круга задач (например, Maple, Mathcad, MatLAB), так и пакеты, реализующие методы решения специальных задач (например, задач гидродинамики).

Результаты расчета анализируются и интерпретируются. При необходимости корректируются параметры метода, а иногда математическая модель, и начинается новый цикл решения задачи.

Все методы решения математических задач можно разделить на два класса: точные и приближенные.

В точных методах решение можно получить в виде аналитического выражения (формулы) но эти методы применимы только для решения ограниченного круга задач.

На практике иногда трудно найти точное решение математической задачи. Поэтому большое значение при решении инженерных задач приобрели численные методы, особенно с возрастанием роли ЭВМ. Современная вычислительная техника требует от инженера знаний основ вычислительной математики и применения этих знаний к решению научно-технических задач.

Развитие вычислительной техники позволило исследовать сложные проблемы и явления с помощью соответствующей математической модели. Такой метод исследования назван вычислительным экспериментом.

Основу вычислительного эксперимента составляет триада: математическая модель; численный метод (алгоритм);программа для ЭВМ.

С развитием вычислительной математики неразрывно связано развитие программирования, которое позволяет упростить способы взаимодействия человека и ЭВМ.

Задачи вычислительной математики

Решение большинства математических задач возможно в двух видах: аналитическом и численном.

Аналитическими решениями занимается классическая математика (математический анализ, линейная алгебра). Основная задача классической математики – установить существование и единственность решения.

Многие математические задачи невозможно решить, используя аналитические методы; либо решения настолько громоздкие, что их практическое использование невозможно. Численное решение любой задачи, как правило, осуществляется приближенно. ***Главная задача численных методов (или вычислительной математики) – нахождение решения с требуемой точностью.***

В широком смысле вычислительную математику определяют как раздел математики, занимающийся разработкой и исследованием вычислительных алгоритмов и их применением к решению конкретных задач.

С развитием возможностей вычислительной техники увеличивается и количество подобных задач. Это, в свою очередь, приводит к развитию самих численных методов.

Реальное проведение любых вычислений проводится над числами, которые задаются не только точно, но и приближенно. Например, запись 7/3 обозначает число, но записать его в виде десятичной дроби можно только приближенно: 2,333... При проведении вычислений на компьютере приближенно приходится записывать большое количество чисел. В результате возникают ошибки, которые постепенно накапливаются и значительно искажают результат.

К настоящему времени все программные средства, благодаря которым на компьютерах проводятся вычисления, имеют возможность регулировать точность проводимых расчетов программно. Можно, например, «поручить» компьютеру вести вычисления с точностью до трех знаков после десятичной запятой, но определение точности результата в этом случае может оказаться сложнейшей математической задачей. Несомненным достоинством численного решения задачи на компьютере является возможность получения решения с требуемой точностью.

Требования к вычислительным (численным) методам можно разделить на две группы. Первая связана с адекватностью дискретной модели исходной математической задаче. Вторая группа связана с реализуемостью численного метода на ЭВМ.

К первой группе относятся такие требования, как устойчивость, сходимость, корректность численного метода.

Метод и алгоритм, по которому ведутся вычисления, может быть устойчивым к приближенным числам и может не быть таковым. *Слова «устойчивый алгоритм» означают, что чем точнее задаются числа для обработки, тем точнее получается результат, или более строго – устойчивость алгоритма означает, что малым отклонениям в исходных* *данных соответствуют малые отклонения в результате (решении).* Примерами методов, которые не являются устойчивыми к приближенным числам, являются метод последовательного исключения неизвестных для решения систем линейных алгебраических уравнений, методы Рунге – Кутта для решения дифференциальных уравнений и ряд других.

Отсутствие устойчивости (или неустойчивость) означает, что даже незначительные погрешности в исходных данных приводят к большим погрешностям в решении, а зачатую к неверному результату. О таких задачах также говорят, что они чувствительны к погрешностям исходных данных.

При анализе точности вычислительного процесса одним из важнейших критериев является сходимость численного метода. Она означает близость получаемого численного решения задачи к истинному решению. Под сходимостью численного метода (алгоритма) понимают способность метода приводить к решению исходной (точному решению) за конечное число шагов, с любой заданной точностью , при любых начальных приближениях.

Сходимость численного метода тесно связана с корректностью. *Задача называется поставленной корректно, если для любых значений исходных данных из некоторого класса ее решение существует, единственное и устойчивое по исходным данным.*

Иногда при решении корректно поставленной задачи может оказаться неустойчивым метод ее решения. Численный алгоритм (метод) называется корректным в случае существования и единственности численного решения при любых значениях исходных данных, а также в случае устойчивости этого решения относительно погрешностей исходных данных.

Вторая группа требований, предъявляемых к численным методам, связана с возможностью реализации данной дискретной модели на данной ЭВМ. Алгоритм, реализующий те или иные вычисления, может требовать различное время для своей работы. Чем меньшее время требует алгоритм, тем он имеет более высокое быстродействие. Точно так же, чем больше компьютерной памяти требуется для реализации алгоритма, тем более высокую сложность по памяти он имеет.

Элементы теории погрешностей

При численном решении математических и прикладных задач неизбежно появление погрешностей на том или ином этапе решения.

Отклонение истинного решения от приближенного называется погрешностью.

Существуют **четыре источника погрешностей**, возникающих в результате численного решения задачи.

1. *Математическая модель.* Погрешность математической модели связана с ее приближенным описанием реального объекта. Например, если при моделировании экономической системы не учитывать инфляции, а считать цены постоянными, трудно рассчитывать на достоверность результатов. Погрешность математической модели называется *неустранимой.* Будем в дальнейшем предполагать, что математическая модель фиксирована и ее погрешность учитывать не будем.

2. *Исходные данные.* Исходные данные, как правило, содержат погрешности, так как они либо неточно измерены, либо являются результатом решения некоторых вспомогательных задач. Например, масса снаряда, производительность оборудования, предполагаемая цена товара и др. Во многих физических и технических задачах погрешность измерений составляет 1 - 10%. Погрешность исходных данных так же, как и погрешность математической модели, считается неустранимой и в дальнейшем учитываться не будет.

3. *Метод вычислений.* Применяемые для решения задачи методы как правило являются приближенными. Например, заменяют интеграл суммой, функцию - многочленом, производную - разностью и т. д. Погрешность метода необходимо определять для конкретного метода. Обычно ее можно оценить и проконтролировать. Следует выбирать погрешность метода так, чтобы она была не более, чем на порядок меньше неустранимой погрешности. Большая погрешность снижает точность решения, а меньшая требует значительного увеличения объема вычислений.

4. *Округление в вычислениях.* Погрешность округления возникает из-за того, что вычисления производятся с конечным числом значащих цифр (для ЭВМ это 10 - 12 знаков). Округление производят по следующему правилу: если в старшем из отбрасываемых разрядов стоит цифра меньше пяти, то содержимое сохраняемых разрядов не изменяется; в противном случае в младший сохраняемый разряд добавляется единица с тем же знаком, что и у самого числа. При решении больших задач производятся миллиарды вычислений, но так как погрешности имеют разные знаки, то они частично взаимокомпенсируются.