### Общая информация

Курс «Вычислительная математика»

**Симаков Сергей Сергеевич**simakov.ss@phystech.edu

Кафедра вычислительной физики

# Вычислительная математика. Введение, обзор курса.

МФТИ

#### Определение

Вычислительная математика изучает алгоритмы решения задач непрерывной математики

#### Определение

Вычислительная математика изучает алгоритмы решения задач непрерывной математики

• **Алгоритм** – последовательность элементарных операций для получения **числового ответа**.

#### Определение

Вычислительная математика изучает алгоритмы решения задач непрерывной математики

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

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

• Вычисление стандартных функций:

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

• Дифференцирование/интегрирование f'(x),  $\int_a^b f(x) dx$ 

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

- ullet Дифференцирование/интегрирование f'(x),  $\int_a^b f(x) \, dx$
- Решение нелинейных уравнений: f(x) = 0

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

- Дифференцирование/интегрирование f'(x),  $\int_a^b f(x) dx$
- Решение нелинейных уравнений: f(x) = 0
- Решение линейных систем Ax = b

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

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

ullet Поиск экстремума функционала:  $F(x) 
ightarrow {\sf min}$ 

- ullet Поиск экстремума функционала:  $F(x) 
  ightarrow {\sf min}$
- Решение нелинейных ОДУ:

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

- ullet Поиск экстремума функционала:  $F(x) 
  ightarrow {\sf min}$
- Решение нелинейных ОДУ:

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

• Решение уравнений в частных производных:

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

- Математическое моделирование
  - Физика
  - Химия
  - Биология
  - Экономика

- Математическое моделирование
  - Физика
  - Химия
  - Биология
  - Экономика
  - **•** . .
- Математическая статистика

- Математическое моделирование
  - Физика
  - ▶ Химия
  - Биология
  - Экономика
  - **.** . . .
- Математическая статистика
- Анализ данных, машинное обучение, оптимизация

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

- Математическое моделирование
  - Физика
  - Химия
  - Биология
  - Экономика
  - **.** . . .
- Математическая статистика
- Анализ данных, машинное обучение, оптимизация
- Обработка сигналов и изображений
- Потоки данных в компьютерных сетях, ...

• Классификация погрешностей, машинная арифметика

- Классификация погрешностей, машинная арифметика
- Вычислительная линейная алгебра

- Классификация погрешностей, машинная арифметика
- Вычислительная линейная алгебра
- Приближение функций

- Классификация погрешностей, машинная арифметика
- Вычислительная линейная алгебра
- Приближение функций
- Численное дифференцирование, численное интегрирование

- Классификация погрешностей, машинная арифметика
- Вычислительная линейная алгебра
- Приближение функций
- Численное дифференцирование, численное интегрирование
- Методы решения нелинейных уравнений

- Классификация погрешностей, машинная арифметика
- Вычислительная линейная алгебра
- Приближение функций
- Численное дифференцирование, численное интегрирование
- Методы решения нелинейных уравнений
- Методы решения ОДУ

### Зачем изучать численные методы?

### Зачем изучать численные методы?

Многие методы уже реализованы, есть готовые программы, зачем это изучать?

• Рассмотрим приближенную формулу для производной

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

• Рассмотрим приближенную формулу для производной

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

• Рассмотрим приближенную формулу для производной

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

$$\approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f'(x) + \frac{1}{2}f''(\xi)\Delta x$$

• Рассмотрим приближенную формулу для производной

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

$$\approx \frac{f(x + \Delta x) - f(x)}{\Delta x} = f'(x) + \frac{1}{2}f''(\xi)\Delta x$$

• Погрешность  $\frac{1}{2}f''(\xi)\Delta x$  должна убывать с уменьшением шага

### Плохая матрица

• Возьмём 2 линейные системы:

$$A_1x_1 = b_1, \ A_1(i,j) = \frac{1}{i+i-1}, i,j = 1, \ldots, n$$

- $A_2x_2=b_2$ ,  $A_2(i,j)$  из равномерного распределения на [0,1]
- Вычислим правые части, соответствующие решению  $\mathbf{x} = [1, 1, \dots, 1]^T$
- Решим (прямым) методом Гаусса и вычислим относительные ошибки в решении

## Неверная интерполяция

#### Неверная интерполяция

• Пусть даны точки  $x_0, \ldots, x_n$  и значения в этих точках  $y_0, \ldots, y_n$ .

#### Неверная интерполяция

- Пусть даны точки  $x_0, \ldots, x_n$  и значения в этих точках  $y_0, \ldots, y_n$ .
- В курсе мы докажем, что  $\exists !$  многочлен степени  $\leq n$   $p_n: p_n(x_k) = y_k, k = \overline{0,n}$

#### Неверная интерполяция

- Пусть даны точки  $x_0, \ldots, x_n$  и значения в этих точках  $y_0, \ldots, y_n$ .
- В курсе мы докажем, что  $\exists !$  многочлен степени  $\leq n$   $p_n: p_n(x_k) = y_k, k = \overline{0,n}$
- Построим интерполяционный многочлен с помощью готовых функций и проверим, проходит ли многочлен через заданные точки

# Расходимость интерполяционного процесса

- С помощью «правильной» реализации интерполяции построим графики многочленов на сгущающихся сетках разного типа:
  - Равномерные сетки
  - Неравномерные сетки вида:

$$x_i = \cos\left(\pi \frac{2i+1}{2(n+1)}\right), i = 0, \dots, n$$

Этот курс будет вам полезен, если вам придется:

Этот курс будет вам полезен, если вам придется:

Использовать готовые реализации стандартных методов для типовых задач

Этот курс будет вам полезен, если вам придется:

Использовать готовые реализации стандартных методов для типовых задач

Подбирать для конкретной задачи оптимальный метод с точки зрения числа операций/точности/...

Этот курс будет вам полезен, если вам придется:

Использовать готовые реализации стандартных методов для типовых задач

Подбирать для конкретной задачи оптимальный метод с точки зрения числа операций/точности/...

Разрабатывать или программировать методы, составными частями которых являются простые методы

Этот курс будет вам полезен, если вам придется:

Использовать готовые реализации стандартных методов для типовых задач

Подбирать для конкретной задачи оптимальный метод с точки зрения числа операций/точности/...

Разрабатывать или программировать методы, составными частями которых являются простые методы

Разрабатывать новые вычислительные методы, исследовать их свойства

• Высокая производительность компьютеров

- Высокая производительность компьютеров
- Языки программирования высокого уровня

- Высокая производительность компьютеров
- Языки программирования высокого уровня
- Готовые реализации основных методов

- Высокая производительность компьютеров
- Языки программирования высокого уровня
- Готовые реализации основных методов

Можно самостоятельно и быстро решать сложные задачи!

#### Типы погрешностей,

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi), \ \xi \in (x,x+h)$$
 (1)

#### Типы погрешностей

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi), \ \xi \in (x,x+h)$$
 (1)

• Ошибки входных данных:

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

#### Типы погрешностей

$$f'(x) pprox rac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + rac{h}{2}f''(\xi), \ \xi \in (x,x+h)$$
 (1)

• Ошибки входных данных:

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

• Ошибки метода:  $E = \frac{h}{2}f''(\xi)$ 

#### Типы погрешностей

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h} = f'(x) + \frac{h}{2}f''(\xi), \ \xi \in (x,x+h)$$
 (1)

• Ошибки входных данных:

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

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





• Число называется *нормализованным*, если старший разряд мантиссы  $\neq 0$ .



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

$$\left| \frac{a - a_M}{a_M} \right| \le ?$$

$$\left| \frac{a - a_M}{a_M} \right| \le ?$$

$$\left| \frac{a - a_M}{a_M} \right| \le ?$$

• 
$$a = 0.1 \dots d_p d_{p+1} \dots \times 2^0$$

$$\left| \frac{a - a_M}{a_M} \right| \le ?$$

• 
$$a = 0.1 \dots d_p d_{p+1} \dots \times 2^0$$

$$|a-a_M| \leq \frac{1}{2} 2^{-p} = 2^{-p-1}, \ p$$
 — длина мантиссы

• 
$$a = 0.1 \dots d_p d_{p+1} \dots \times 2^0$$

$$|a-a_M| \leq rac{1}{2} 2^{-p} = 2^{-p-1}, \ p$$
 — длина мантиссы

- Округление до ближайшего машинного числа
- $a = 0.1 \dots d_p d_{p+1} \dots \times 2^0$
- $|a-a_M| \leq \frac{1}{2} 2^{-p} = 2^{-p-1}, \ p$  длина мантиссы

#### Определение

Верхнюю границу относительной ошибки  $\epsilon$  называют машинным эпсилон.

#### Одинарная точность

1	8	23
знак	показатель	мантисса

#### Одинарная точность

1	8	23
знак	показатель	мантисса

• 
$$a = (-1)^s \times 2^{e-127} \times (1+f)$$

#### Одинарная точность

1	8	23
знак	показатель	мантисса

• 
$$a = (-1)^s \times 2^{e-127} \times (1+f)$$

• 
$$\epsilon = 2^{-24} \approx 6 \times 10^{-8}$$

#### Одинарная точность

1	8	23
знак	показатель	мантисса

• 
$$a = (-1)^s \times 2^{e-127} \times (1+f)$$

• 
$$\epsilon = 2^{-24} \approx 6 \times 10^{-8}$$

 $\bullet$  Диапазон чисел  $[10^{-38}, 10^{38}]$ 

# IEEE-стандарт. Двойная точность

# IEEE-стандарт. Двойная точность

#### Двойная точность

1	11	52
знак	показатель	мантисса

## IEEE-стандарт. Двойная точность

#### Двойная точность

1	11	52
знак	показатель	мантисса

• 
$$a = (-1)^s \times 2^{e-1023} \times (1+f)$$

### IEEE-стандарт. Двойная точность

#### Двойная точность

1	11	52
знак	показатель	мантисса

• 
$$a = (-1)^s \times 2^{e-1023} \times (1+f)$$

• 
$$\epsilon = 2^{-53} \approx \times 10^{-16}$$

### IEEE-стандарт. Двойная точность

#### Двойная точность

1	11	52
знак	показатель	мантисса

• 
$$a = (-1)^s \times 2^{e-1023} \times (1+f)$$

• 
$$\epsilon = 2^{-53} \approx \times 10^{-16}$$

 $\bullet$  Диапазон чисел  $[10^{-308}, 10^{308}]$ 

ullet Обозначим \* одну из операций +,-, imes,/

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

- ullet Обозначим \* одну из операций +,-, imes,/
- fl(a\*b) результат округления a\*b

#### Определение

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

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

- ullet Обозначим \* одну из операций +,-, imes,/
- fl(a\*b) результат округления a\*b

#### Определение

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

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

```
s = 0.
for i = 1,n
s = s + x[i] * y[i]
```

```
s = 0.
for i = 1,n
s = s + x[i] * y[i]
```

• 
$$s_1 = 0 + x_1y_1(1 + \delta_1) = x_1y_1(1 + \delta)$$

$$s = 0.$$
  
for  $i = 1,n$   
 $s = s + x[i] * y[i]$ 

• 
$$s_1 = 0 + x_1y_1(1 + \delta_1) = x_1y_1(1 + \delta)$$

• 
$$s_2 = (s_1 + x_2y_2(1+\delta_2))(1+\delta_3) = x_1y_1(1+\delta)^2 + x_2y_2(1+\delta)^2$$

$$s = 0.$$
  
for  $i = 1,n$   
 $s = s + x[i] * y[i]$ 

• 
$$s_1 = 0 + x_1y_1(1 + \delta_1) = x_1y_1(1 + \delta)$$

• 
$$s_2 = (s_1 + x_2y_2(1+\delta_2))(1+\delta_3) = x_1y_1(1+\delta)^2 + x_2y_2(1+\delta)^2$$

• 
$$s_M = (x_1y_1 + x_2y_2)(1+\delta)^n + x_3y_3(1+\delta)^{n-1} + \dots$$

• При  $n\epsilon < 1$ :

$$\prod_{i=1}^{n} (1+\delta_i) \leq (1+\epsilon)^n = 1 + n\epsilon + O(\epsilon^2)$$

• При  $n\epsilon < 1$ :

$$\prod_{i=1}^n (1+\delta_i) \leq (1+\epsilon)^n = 1 + n\epsilon + O(\epsilon^2)$$
 $\prod_{i=1}^n (1+\delta_i) \geq (1-\epsilon)^n \geq 1 - n\epsilon + O(\epsilon^2)$ 

 $\bullet$  При  $n\epsilon < 1$ :

$$egin{aligned} \prod_{i=1}^n (1+\delta_i) &\leq (1+\epsilon)^n = 1 + n\epsilon + O(\epsilon^2) \ \prod_{i=1}^n (1+\delta_i) &\geq (1-\epsilon)^n \geq 1 - n\epsilon + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

$$ullet$$
  $oldsymbol{s}_M = \sum_{i=1}^n (1+\Delta_i) x_i y_i$  где с точностью до  $O(\epsilon^2) \; |\Delta_i| \leq n\epsilon$ 

• При  $n\epsilon < 1$ :

$$egin{aligned} \prod_{i=1}^n (1+\delta_i) &\leq (1+\epsilon)^n = 1 + n\epsilon + O(\epsilon^2) \ \prod_{i=1}^n (1+\delta_i) &\geq (1-\epsilon)^n \geq 1 - n\epsilon + O(\epsilon^2) \end{aligned}$$

• 
$$s_M = \sum_{i=1}^n (1+\Delta_i)x_iy_i$$
 где с точностью до  $O(\epsilon^2) \ |\Delta_i| \le n\epsilon$ 
•  $|s_M - s| = |\sum_{i=1}^n \Delta_i x_i y_i| \le n\epsilon \langle |x|, |y| \rangle$ 

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

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

$$\tilde{f}'_{M} = \frac{f(x+h)(1+\delta_{1}) - f(x)(1+\delta_{2})}{h} =$$
(2)

$$\tilde{f}'_{M} = \frac{f(x+h)(1+\delta_{1}) - f(x)(1+\delta_{2})}{h} =$$
 (3)

$$f'(x) pprox \tilde{f}' = \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$
 (2)

$$\tilde{f}'_{M} = \frac{f(x+h)(1+\delta_{1}) - f(x)(1+\delta_{2})}{h} =$$
 (3)

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

$$\tilde{f}'_{M} = \frac{f(x+h)(1+\delta_{1}) - f(x)(1+\delta_{2})}{h} =$$

$$= \frac{f(x+h) - f(x)}{h} + \frac{f(x+h)\delta_{1} - f(x)\delta_{2}}{h}$$
(4)

23 / 25

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

$$\tilde{f}'_{M} = \frac{f(x+h)(1+\delta_{1}) - f(x)(1+\delta_{2})}{h} =$$
 (3)

$$=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}+\frac{f(x+h)\delta_1-f(x)\delta_2}{h} \tag{4}$$

$$|\tilde{f}_M' - f'(x)| \le \underbrace{\left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right|}_{\text{ошибка метода}} +$$
 (5)

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

$$\tilde{f}'_{M} = \frac{f(x+h)(1+\delta_{1}) - f(x)(1+\delta_{2})}{h} =$$
 (3)

$$=\frac{f(x+h)-f(x)}{h}+\frac{f(x+h)\delta_1-f(x)\delta_2}{h} \tag{4}$$

$$|\tilde{f}_M' - f'(x)| \le \underbrace{\left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right|}_{$$
ошибка метода} + (5)

$$\underbrace{\left|\frac{f(x+h)\delta_1 - f(x)\delta_2}{h}\right|}_{\text{ошибка округления}} \tag{6}$$

$$\left|\frac{f(x+h)-f(x)}{h}-f'(x)\right|=$$

$$\left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$\left| \frac{f(x) + f'(x)h + f''(\xi)h^2/2 - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$\left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$\left| \frac{f(x) + f'(x)h + f''(\xi)h^2/2 - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$= |f''(\xi)\frac{h}{2}| \le \frac{M_2h}{2}, \quad M_2 = \max_{x} |f''(x)|$$

$$\left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$\left| \frac{f(x) + f'(x)h + f''(\xi)h^{2}/2 - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$= |f''(\xi)\frac{h}{2}| \le \frac{M_{2}h}{2}, \quad M_{2} = \max_{x} |f''(x)|$$

$$\left| \frac{f(x+h)\delta_{1} - f(x)\delta_{2}}{h} \right| \le \frac{2M_{0}\epsilon}{h}, \quad M_{0} = \max_{x} |f(x)|$$

$$\left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$\left| \frac{f(x) + f'(x)h + f''(\xi)h^2/2 - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$= |f''(\xi)\frac{h}{2}| \le \frac{M_2h}{2}, \quad M_2 = \max_x |f''(x)|$$

$$\left| \frac{f(x+h)\delta_1 - f(x)\delta_2}{h} \right| \le \frac{2M_0\epsilon}{h}, \quad M_0 = \max_x |f(x)|$$

$$E(h) = \frac{M_2h}{2} + \frac{2M_0\epsilon}{h} \to \min$$

$$\left| \frac{f(x+h) - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$\left| \frac{f(x) + f'(x)h + f''(\xi)h^{2}/2 - f(x)}{h} - f'(x) \right| =$$

$$= |f''(\xi)\frac{h}{2}| \le \frac{M_{2}h}{2}, \quad M_{2} = \max_{x} |f''(x)|$$

$$\left| \frac{f(x+h)\delta_{1} - f(x)\delta_{2}}{h} \right| \le \frac{2M_{0}\epsilon}{h}, \quad M_{0} = \max_{x} |f(x)|$$

$$E(h) = \frac{M_{2}h}{2} + \frac{2M_{0}\epsilon}{h} \to \min$$

$$E'(h) = \frac{M_{2}}{2} - \frac{2M_{0}\epsilon}{h^{2}} = 0 \Rightarrow h^{*} = \left(\frac{4M_{0}\epsilon}{M_{2}}\right)^{1/2}$$

• Задачи, решаемые методами вычислительной математики

- Задачи, решаемые методами вычислительной математики
- Особенности вычислительных методов

- Задачи, решаемые методами вычислительной математики
- Особенности вычислительных методов
- Типы ошибок

- Задачи, решаемые методами вычислительной математики
- Особенности вычислительных методов
- Типы ошибок
- Машинная арифметика

- Задачи, решаемые методами вычислительной математики
- Особенности вычислительных методов
- Типы ошибок
- Машинная арифметика
- Исследование влияния ошибок округления