Предмет вычислительной математики. Классификация погрешностей. Численное дифференцирование.

к.ф.-м.н. Уткин Павел Сергеевич
e-mail: utkin@icad.org.ru, pavel_utk@mail.ru
(926) 2766560

Данная лекция доступна по адресу:
http://mipt.ru/education/chair/computational_mathematics/study/materials/compmath/lectures/

6 сентября 2014 г., МФТИ, Долгопрудный

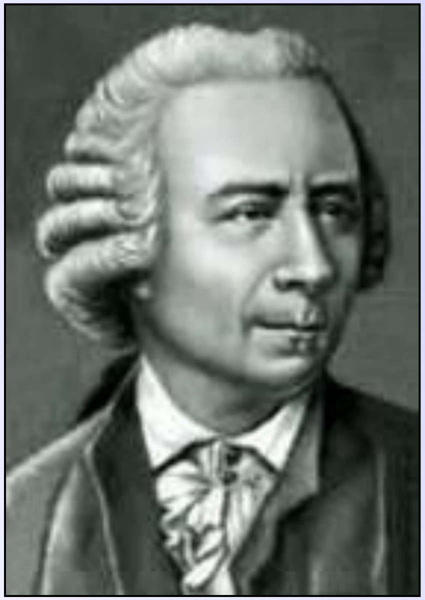
Предмет вычислительной математики

Краткий экскурс в историю

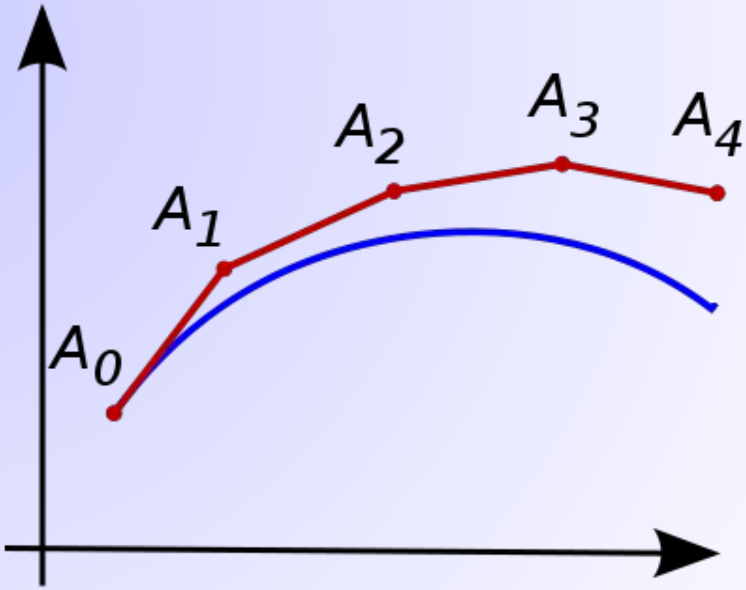
1768 г. – Леонард Эйлер, метод ломаных

$$\frac{du}{dx} = G(x,u), \; u(0) = u_0$$

$$u_{n+1} = u_n + hG(x_n, u_n)$$

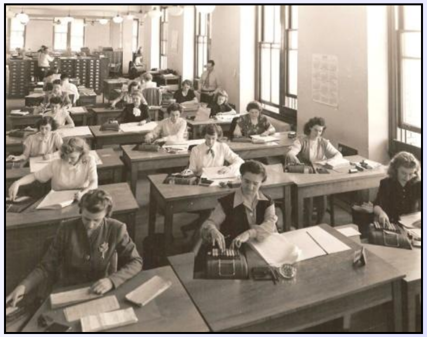


Леонард Эйлер (1707 – 1783)



Вычислительная математика в наше время

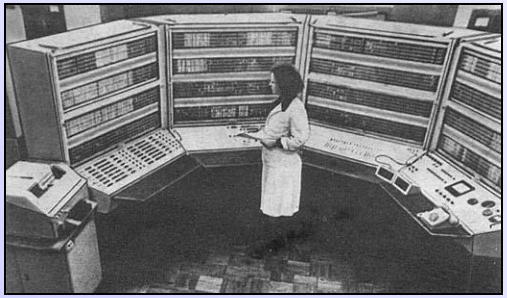
1950-ые



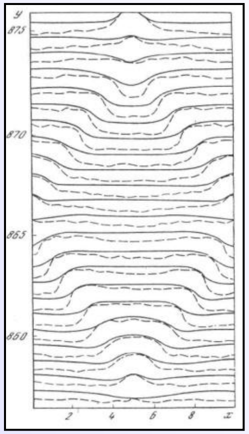
Женщины с арифмометрами, работали пока не уставали…

Первая Советская атомная бомба

1970-ые



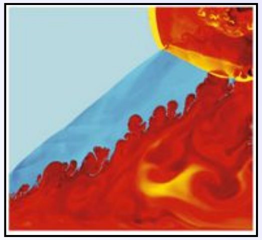
БЭСМ-6, **1 MFlops**



Первые многомерные расчеты

1990-ые

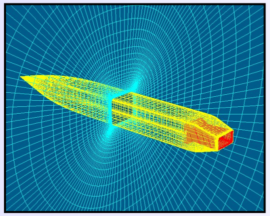
Кластеры типа Beowolf, **~ 10 GFlops**



Серийные двумерные расчеты с достаточной разрешающей способностью

2014 год

Tianhe-2 (Китай), более 3 000 000 вычислительных ядер, ~ **55 PFlops**



Сложные трехмерные расчетные сетки

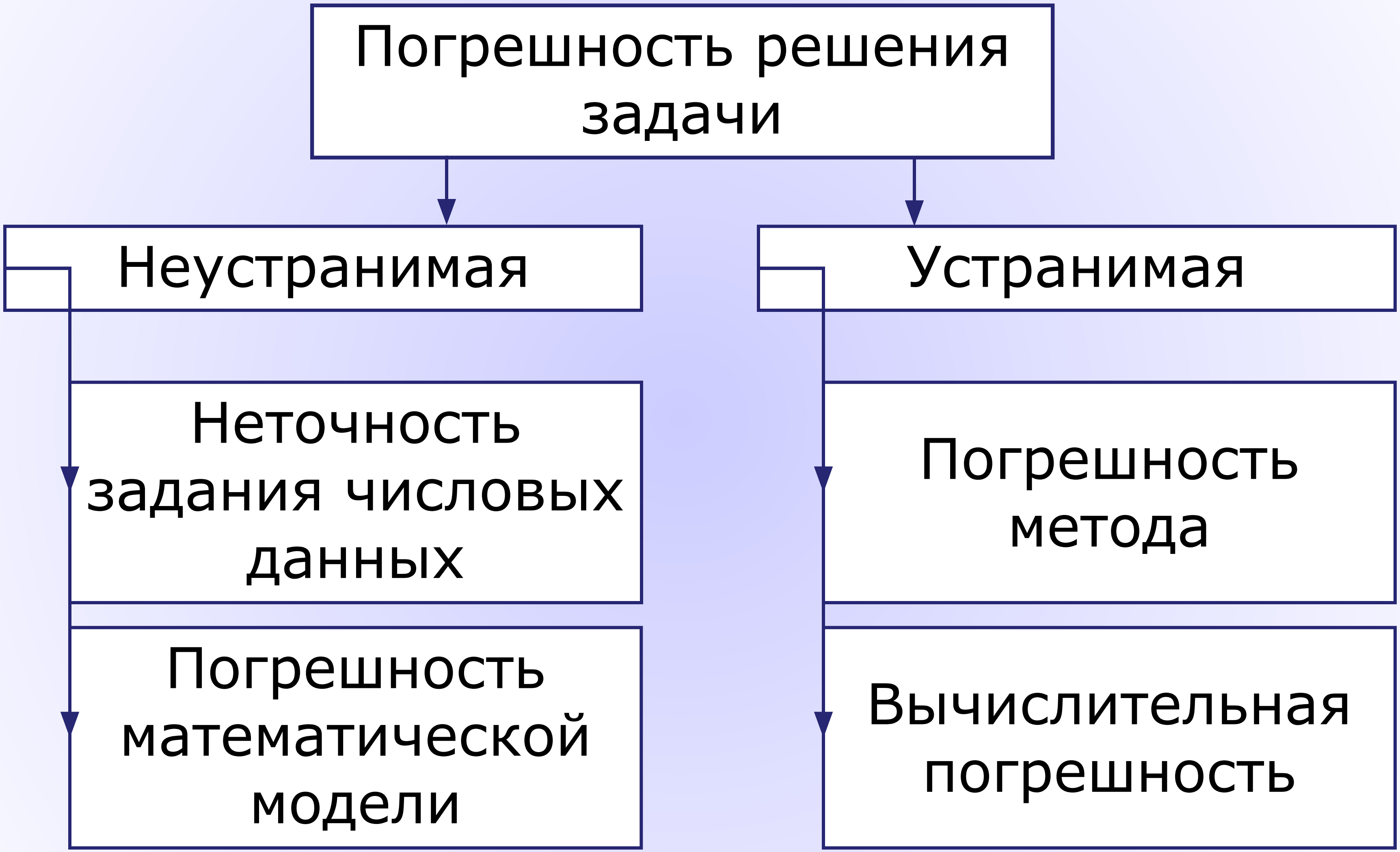
Трехмерное моделирование

Специфика вычислительной математики

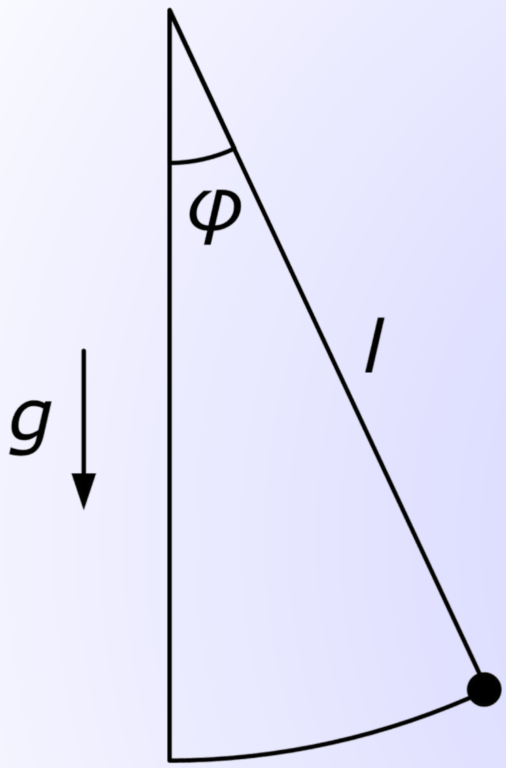
- Вычислительная математика имеет дело не только с непрерывными, но и с дискретными объектами $\rightarrow$ погрешность метода;
- Погрешность вычислений в связи с ошибками округления;
- Имеет значение обусловленность задач, т.е. чувствительность решения к малым изменениям входных данных;
- Выбор вычислительного алгоритма, вообще говоря, влияет на результат вычислений;
- Важная черта численного метода – экономичность, т.е. требование минимизации числа операций.

Классификация погрешностей

Классификация погрешностей



Пример – колебания математического маятника



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

- Неустранимая погрешность – трение зависит от скорости не совсем линейно + погрешность определения g, l, начальных условий; $\Delta_1 = |\ \varphi_1 - \varphi\ |$.
- Погрешность метода – дифференциальное уравнение не решается точно, требуется применить какой-либо численный метод; $\Delta_2 = |\ \varphi_2 - \varphi_1\ |$.
- Вычислительная погрешность связана, например, с конечностью разрядной сетки; $\Delta_3 = |\ \varphi_3 - \varphi_2\ |$.

$$\Delta_\Sigma = |\ \varphi_3 - \varphi\ | = |\ \varphi_3 - \varphi_2 + \varphi_2 - \varphi_1 + \varphi_1 - \varphi\ | \le \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3$$

$$\boxed{\Delta_\Sigma \le \Delta_1 + \Delta_2 + \Delta_3}$$

Вычислительная погрешность

Машинное представление вещественных чисел:

[redacted]

$x_{маш} = x \cdot (\ 1 + \varepsilon(x)\ )$, где мерой $\varepsilon(x)$ может служить «машинное эпсилон» ε – наименьшее положительное число, для которого $(\ 1 + \varepsilon(x)\ )_{маш} \geq 1$

Утверждение 1.1. Относительная погрешность округления при представлении вещественного числа в ЭВМ $\boldsymbol{\varepsilon \approx 2^{-t}}$, где t – разрядность мантиссы.

В расчетах с двойной точностью $t = 52$, $\boldsymbol{\varepsilon_{double} \approx 10^{-16}}$

Приближенное вычисление значения синуса с помощью разложения в ряд Тейлора

[redacted]

Ряд сходится для любого значения *x*

(Тер-Крикоров А.М., Шабунин М.И. Курс математического анализа. – М.: Физматлит, 2001. – С. 439.)

Напишем программу для вычисления

значения синуса при:

- $X_1 = п / 6 \approx 0.52366$
- $X_2 = 12п + п / 6 \approx 38.22277$

Иллюстрация понятия вычислительной погрешности (2)

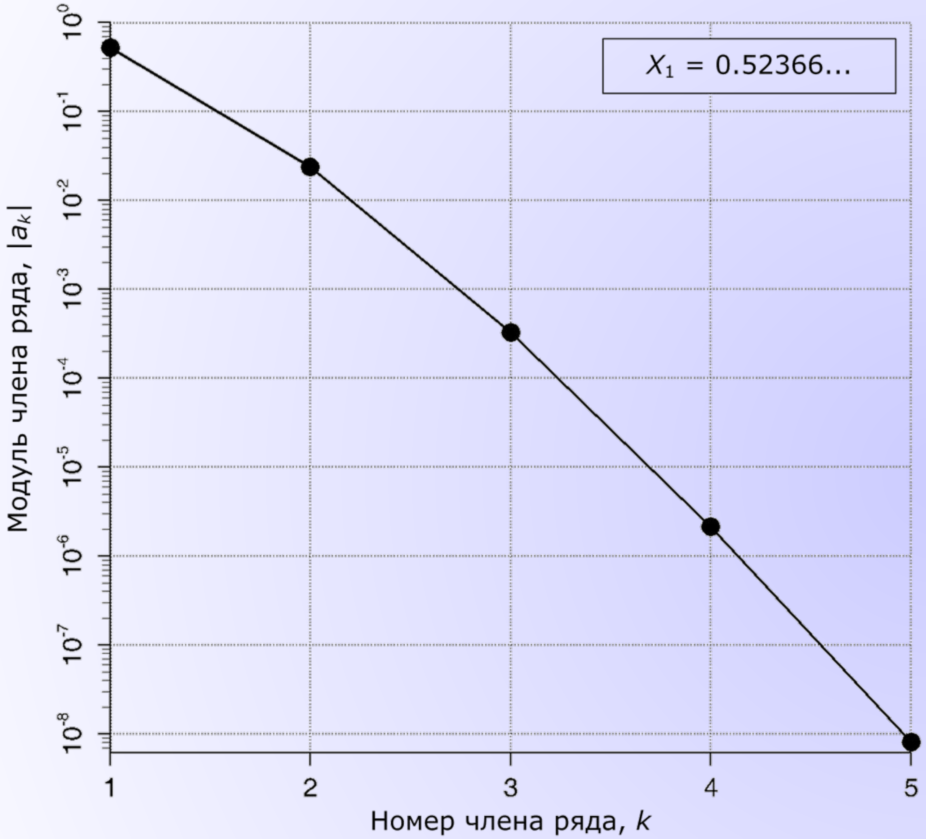
```
#define EPS 1.e-8
#define X0.52366
...
int i, k = 0;
double curr_sum = 0.0, curr_sum_old = 0.0, fact;
do {
   fact = 1.0;
   for ( i = 1; i<= 2*k+1; i++ )
      fact *= i;
   curr_sum_old = curr_sum;
   curr_sum += pow( -1, k) * pow( X, 2*k+1 ) / fact;
   k++;
} while ( fabs( curr_sum - curr_sum_old ) > EPS );
```

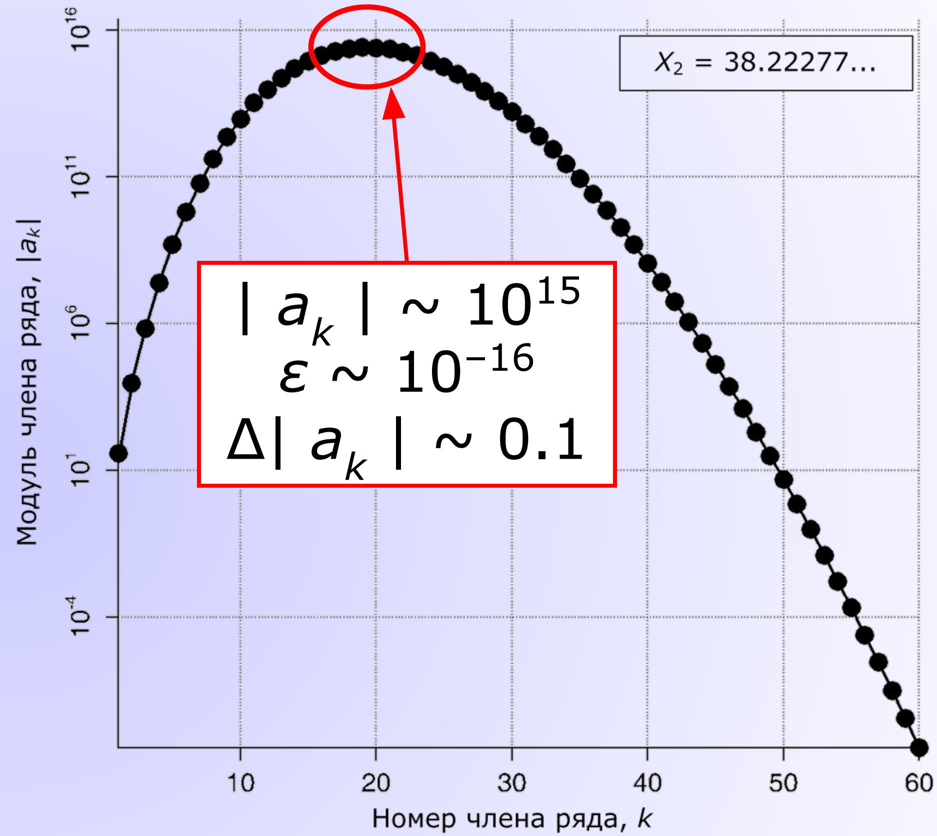
Результат расчета значения синуса:

- Для X_1 = 0.52366: **0.500053…**
- Для X_2 = 38.22277: **1.165079…**

Иллюстрация понятия вычислительной погрешности (3)

Причина – быстрый рост ошибок округления



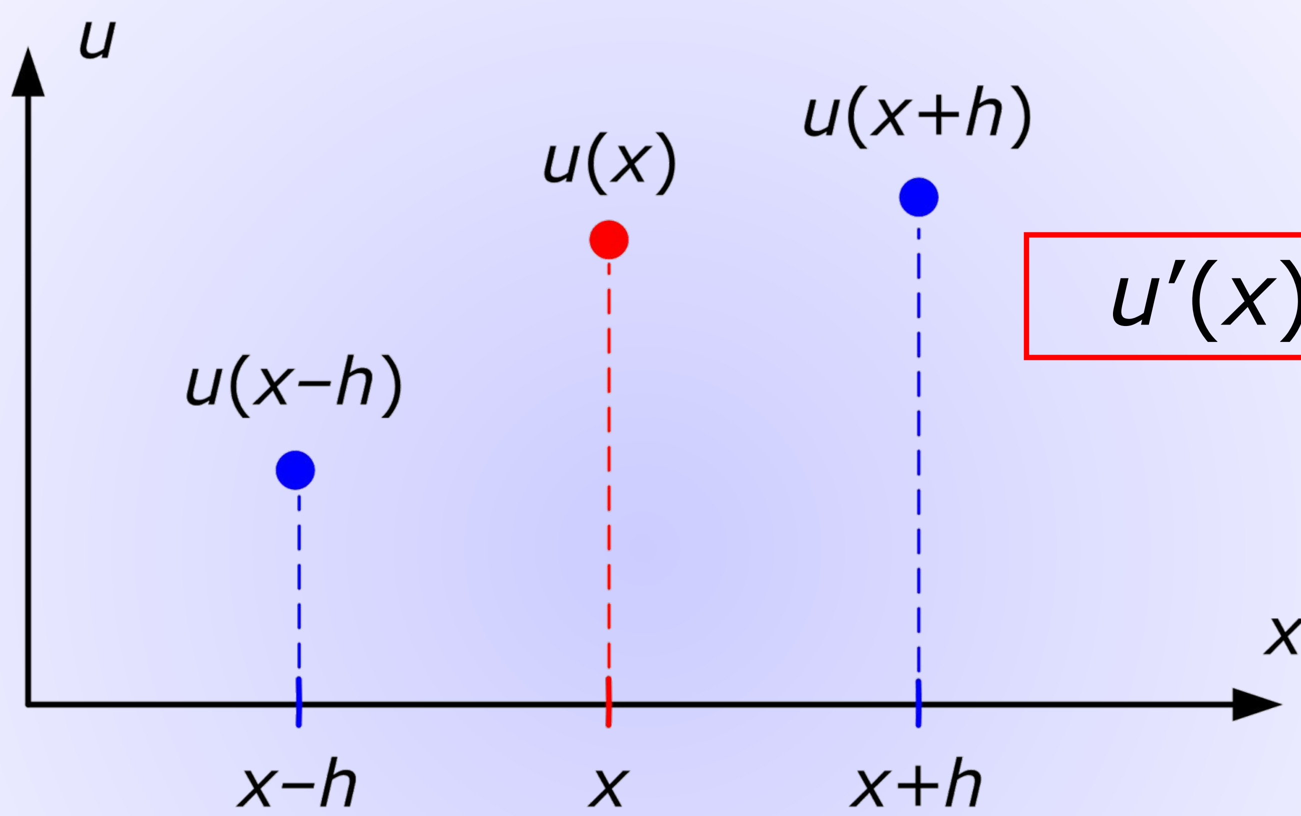


Для $|\,X\,| < 1$: $|\,a_k\,|$ монотонно убывают

Для $|\,X\,| > 1$: $|\,a_k\,|$ сначала возрастают, а затем убывают

Численное дифференцирование

Численное дифференцирование – простейший пример



$$\boxed{u'(x) \approx ?}$$

$$u'(x) \approx u'_h(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h}$$

Оценка погрешности метода

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

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

$$\Delta_{метод} = \left|u'(x) - u'_h(x)\right| = \frac{h}{2}\left|u''(\xi)\right|, \;\; \xi \in [x;\; x+h]$$

$$\boxed{\Delta_{метод} \le \frac{h}{2}\max_{\xi\in[x;\; x+h]}\left|u''(\xi)\right|}$$

Погрешность метода рассматривается как мера малости по степеням h. Говорят, что погрешность метода $O(h)$, а сам метод обладает первым порядком аппроксимации.

Полная погрешность

Пусть *u(x)* вычисляется с неустранимой погрешностью *δ*

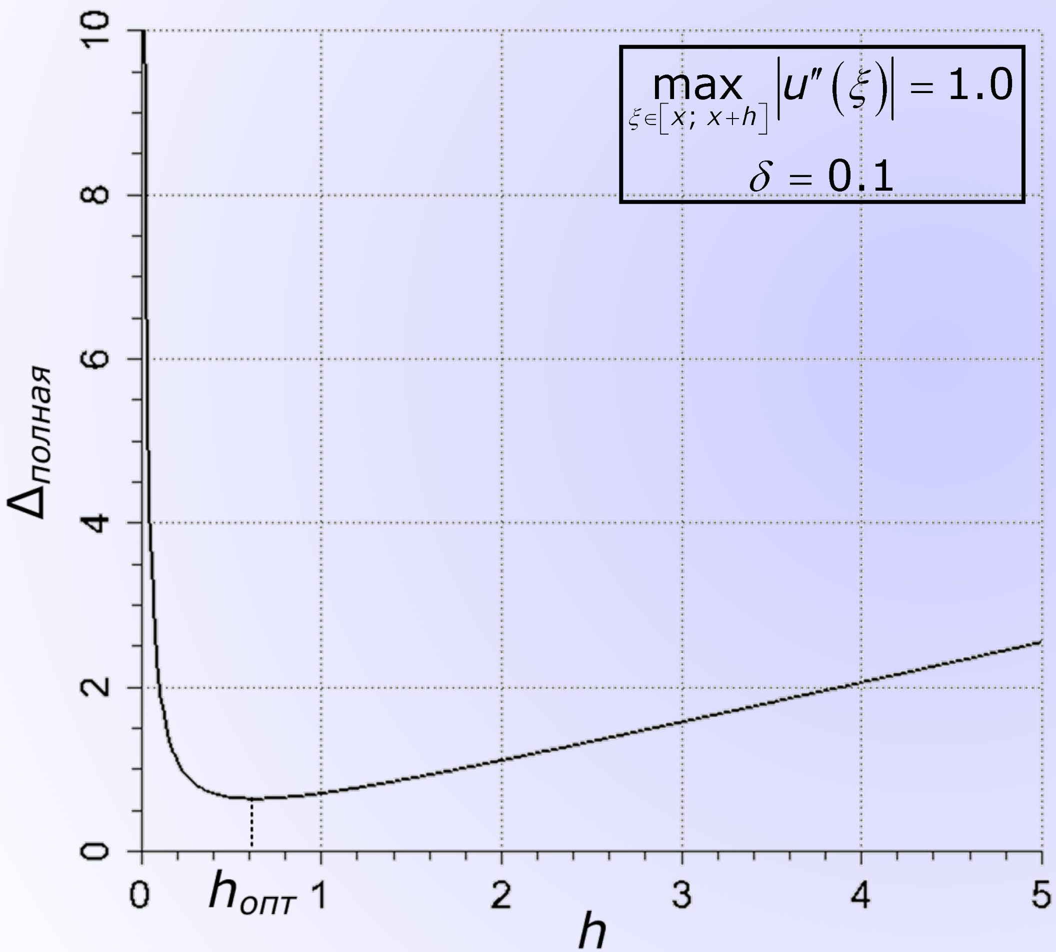
$$u'_h(x) = \frac{u(x+h) - u(x)}{h} \rightarrow \boxed{\Delta_{неустр} = \frac{2\delta}{h}}$$

$$\Delta_{полная} = \Delta_{полная}(h) = \frac{h}{2} \max_{\xi \in [x;\, x+h]} \left| u''(\xi) \right| + \frac{2\delta}{h}$$

Погрешность метода прямо пропорциональна *h*, неустранимая – обратно пропорциональна. Значит, существует оптимальный шаг рассматриваемой формулы численного дифференцирования.

Определение оптимального шага

$$\Delta'\left(h_{опт}\right) = \frac{1}{2}\max_{\xi\in\left[x;\,x+h\right]}\left|u''\left(\xi\right)\right| - \frac{2\delta}{h_{опт}^2} = 0$$

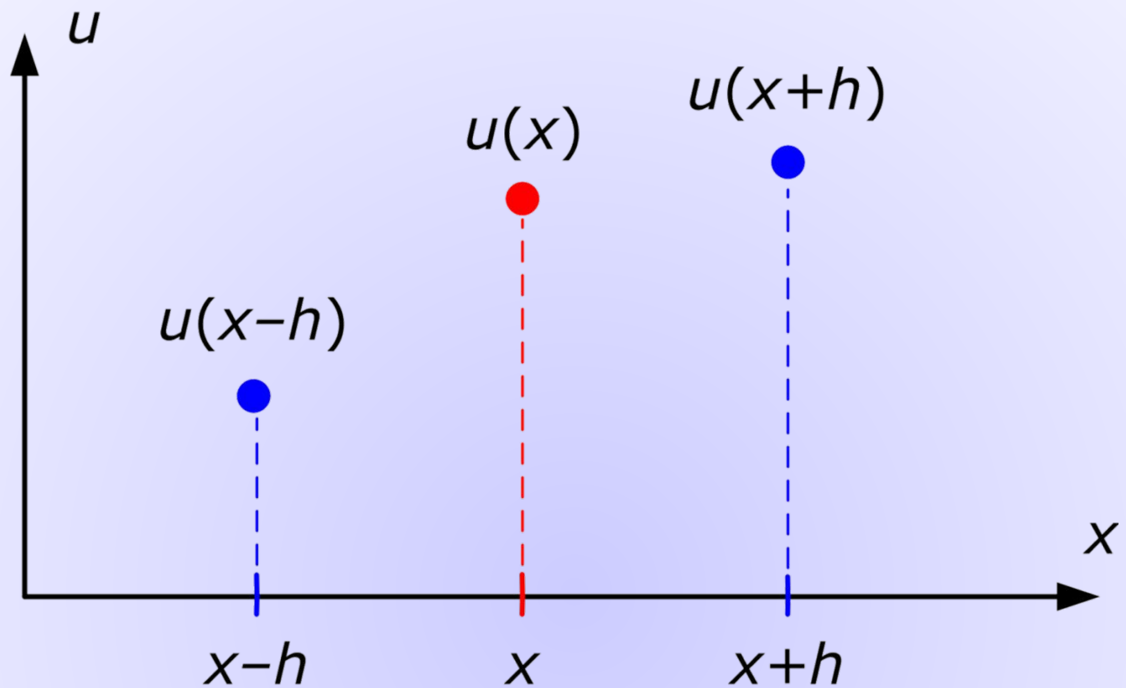


$$\boxed{h_{опт} = 2\sqrt{\frac{\delta}{\max_{\xi\in\left[x;\,x+h\right]}\left|u''\left(\xi\right)\right|}}}$$

$$\max_{\xi\in\left[x;\,x+h\right]}\left|u''\left(\xi\right)\right| \neq 0$$

Рассматриваемая формула точна для линейной функции *u(x)*, погрешность метода 0

Численное дифференцирование – другие примеры



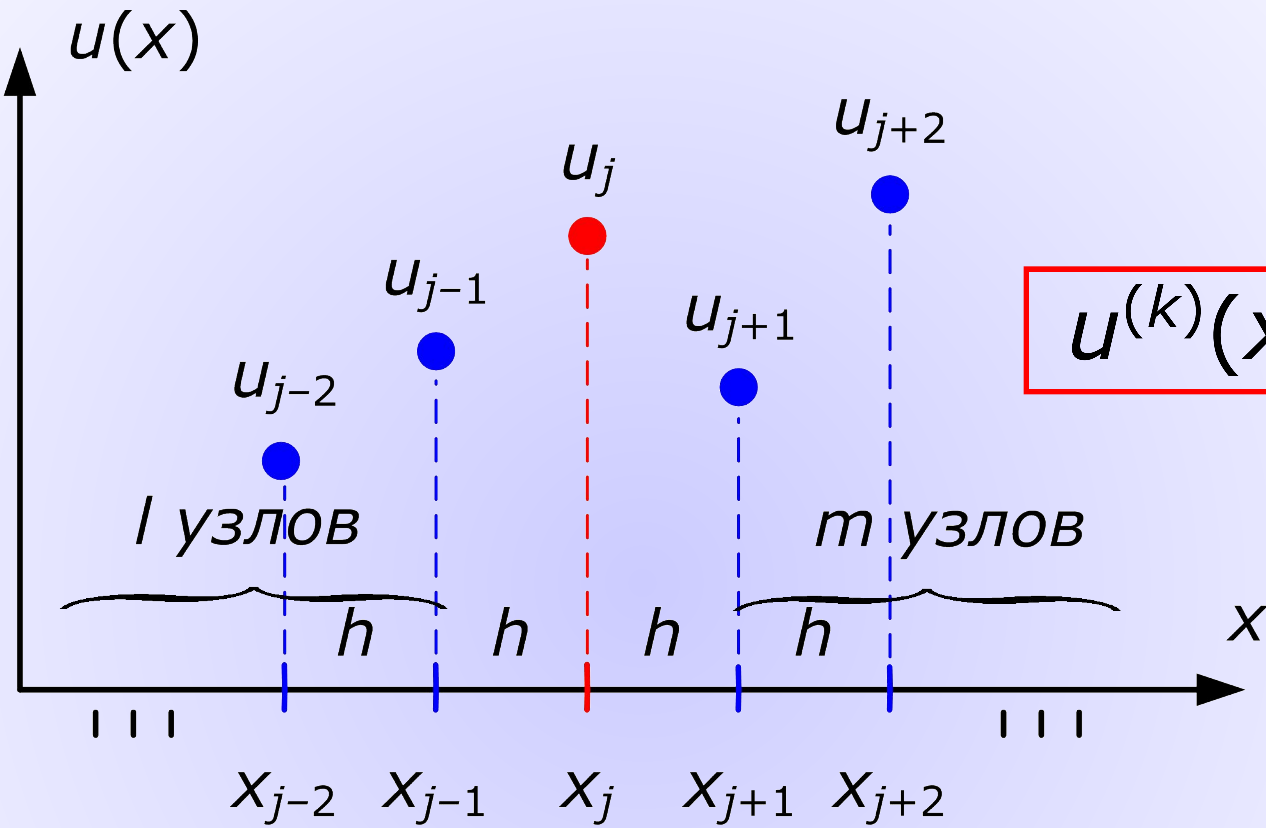
$$u'_{h1}(x)=\frac{u(x+h)-u(x)}{h}$$

$$u'_{h2}(x)=\frac{u(x)-u(x-h)}{h}$$

$$u'_{h3}(x)=\frac{u(x+h)-u(x-h)}{2h}$$

$$u'_{h\bar{\alpha}}(x)=\frac{1}{h}\left(\alpha_1 u(x+h)+\alpha_0 u(x)+\alpha_{-1}u(x-h)\right)$$

Постановка задачи численного дифференцирования



$$\boxed{u^{(k)}(x_j) \approx ?}$$

Метод неопределенных коэффициентов:

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

Формирование системы уравнений

Для простоты рассмотрим случай $k = 1$

$$u\left(x_j + ih\right) = u\left(x_j\right) + (ih)u'\left(x_j\right) + \frac{(ih)^2}{2}u''\left(x_j\right) +$$

$$+\frac{(ih)^3}{6}u^{(3)}\left(x_j\right) + \ldots + \frac{(ih)^n}{n!}u^{(n)}\left(x_j\right) + \ldots$$

$$u'\left(x_j\right) \approx \frac{u\left(x_j\right)}{h}\sum_{i=-l}^{m}\alpha_i + u'\left(x_j\right)\sum_{i=-l}^{m} i\alpha_i + u''\left(x_j\right)\sum_{i=-l}^{m}\frac{i^2 h}{2}\alpha_i +$$

$$+u^{(3)}\left(x_j\right)\sum_{i=-l}^{m}\frac{i^3 h^2}{6}\alpha_i + \ldots + u^{(n)}\left(x_j\right)\sum_{i=-l}^{m}\frac{i^n h^{n-1}}{n!}\alpha_i + \ldots$$

Система уравнений для нахождения коэффициентов

$$\begin{cases} \sum\limits_{i=-l}^{m} \alpha_i = 0 \\ \sum\limits_{i=-l}^{m} i\alpha_i = 1 \\ \sum\limits_{i=-l}^{m} i^2\alpha_i = 0 \\ \dots \\ \sum\limits_{i=-l}^{m} i^n\alpha_i = 0 \end{cases}$$

Получили систему линейных уравнений для нахождения коэффициентов $\{\alpha_i\}$

Число неизвестных равно числу уравнений при условии:

$$\boldsymbol{n = l + m}$$

Остаточный член имеет n-ый порядок аппроксимации

Разрешимость полученной системы уравнений

$$A\bar{\alpha} = \bar{b}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ -l & -l+1 & -l+2 & \dots & m \\ (-l)^2 & (-l+1)^2 & (-l+2)^2 & \dots & m^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ (-l)^n & (-l+1)^n & (-l+2)^n & \dots & m^n \end{bmatrix} \qquad \bar{b} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \dots \\ 0 \end{bmatrix}$$

Определитель матрицы A – детерминант Вандермонда. В случае различия всех узлов шаблона $det\ A \neq 0$, и, значит, существует единственное решение системы – набор коэффициентов.

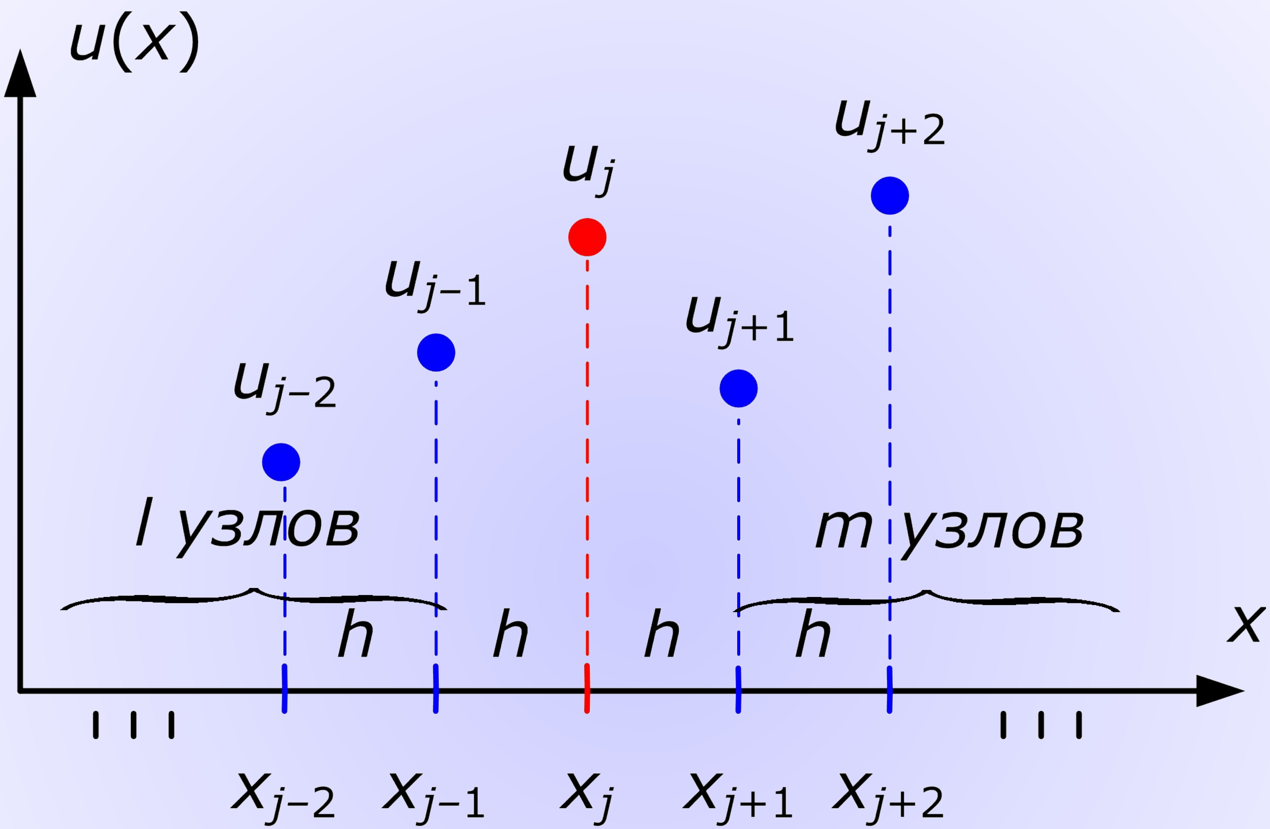
Определитель Вандермонда

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

$$\Updownarrow$$

существует пара $\left(x_i, x_j \right)$: $x_i = x_j,\ i \ne j$

Общее теоретическое утверждение

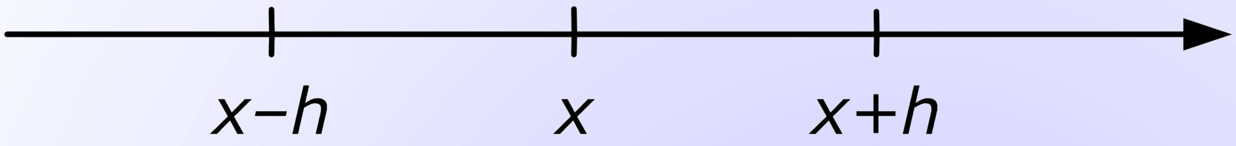


На шаблоне из N точек с помощью метода неопределенных коэффициентов всегда можно построить единственную формулу для вычисления производной k-го порядка (k от 1 до $N-1$) с точностью по крайней мере $O(h^{N-k})$.

Замечание

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 повышения порядка не будет, но справедливо $\alpha_i = -\alpha_{-i}$, $\alpha_0 = 0$.

Пример использования метода неопределенных коэффициентов (1)



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

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

с максимальным порядком

[redacted]

[redacted]

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

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

Пример использования метода неопределенных коэффициентов (2)

[redacted]

$$\begin{cases} \alpha_1' + \alpha_0' + \alpha_{-1}' = 0 \\ \alpha_1' - \alpha_{-1}' = 1 \\ \alpha_1' + \alpha_{-1}' = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \alpha_{-1}' = -1/2 \\ \alpha_0' = 0 \\ \alpha_1' = 1/2 \end{cases}$$

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

[redacted]

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

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

Примерный план лекций

1. Введение. Погрешности. Численное дифференцирование. (06.09)
2. Интерполяция. Полиномы Лагранжа и Ньютона. Интерполяция по Чебышевским узлам. (13.09)
3. Обусловленность задачи интерполяции. Сплайн-интерполяция. (20.09)
4. Численное интегрирование. (27.09)
5. Введение в методы решения СЛАУ. Нормы векторов и матриц. Число обусловленности матрицы СЛАУ. (04.10)
6. Прямые методы решения СЛАУ. (11.10)
7. Итерационные методы решения СЛАУ. Полусеместровая контрольная работа. (18.10)
8. Вариационные методы решения СЛАУ. (25.10)
9. Метод наименьших квадратов. (01.11)
10. Методы решения нелинейных уравнений и систем. (08.11)
11. Основные понятия теории разностных схем. (15.11)
12. Простейшие численные методы решения задач Коши для ОДУ. Методы Рунге-Кутты. (22.11)
13. Численное решение краевых задач для ОДУ. (29.11)
14. Семестровая контрольная работа. (06.12)

Рекомендованная литература

1. Петров И.Б., Лобанов А.И. Лекции по вычислительной математике: учеб. пособие. – М.: Интернет-Университет Информационных Технологий. Бином. Лаборатория знаний, 2006.
2. Косарев В.И. 12 лекций по вычислительной математике (вводный курс): учеб. пособие. – 2-е изд., испр. и доп. – М.: Изд-во МФТИ, 2000.
3. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы. – М.: Наука, 1989.
4. Рябенький В.С. Введение в вычислительную математику: учеб. пособие. – 2-е изд., испр. – М.: Физматлит, 2000.
5. Федоренко Р.П. Введение в вычислительную физику: учеб. пособие. – М.: Изд-во МФТИ, 1994.
6. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2008.
7. Press W.H. et al. Numerical Recipes in C. – Cambridge University Press, 1992.

Заключение

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.