ОСНОВНЫЕ ПОНЯТИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ПОГРЕШНОСТЕЙ

- *Предмет вычислительной математики. Основные понятия вычислительной математики: линейные, метрические и нормированные пространства, сходящиеся и фундаментальные последовательности, открытые и замкнутые шары. Полные метрические пространства. Примеры.*
- *Элементы общей теории погрешностей и компьютерной арифметики. Основные определения, утверждения, примеры.*
- *Прямые и итерационные методы и алгоритмы.*

Предмет вычислительной математики

- ***Математическая модель*** –приближенное математическое описание объекта (технологического процесса, реакции, явления и т.д.).
- ***Математическое моделирование, вычислительный эксперимент*** – для исследования на ЭВМ очень сложных процессов (натурный эксперимент не возможен).

Основные этапы математического моделирования:

- Разработка модели – *формализация*.
- Разработка метода (алгоритма) для решения уравнений модели или определения ее параметров.
- Проведение необходимых расчетов (создание программ, тестирование, получение результатов).
- Анализ результатов – *практическое использование*.

Основные понятия: метрические пространства

- ***Главная задача численных методов*** – фактическое нахождение решения с требуемой или, по крайней мере, оцениваемой точностью.
- Отклонение истинного решения от приближенного называется ***погрешностью***.
- Для оценки близости полученного решения к истинному необходимо ввести понятие расстояния (метрики) между парой элементов некоторого множества.
- Множество элементов одной природы называется ***метрическим пространством***, если в нем введено расстояние (метрика) $\rho(x, y)$, которое удовлетворяет следующим условиям:
- 1) $\rho(x, y) \geq 0$ - вещественное неотрицательное число
- 2)
- $\rho(x, y) = 0 \Leftrightarrow x \equiv y$
- 3 $\rho(x, y) = \rho(y, x)$ - свойство симметрии
- 4) $\rho(x, y) \leq \rho(x, z) + \rho(z, y)$ - неравенство треугольника

Линейные пространства

- ***Линейное пространство-*** частный случай метрического. В нем определены операции сложения элементов и умножения их на число, при этом выполнены аксиомы:
- 1) $x + y = y + x$
- 2) $(x + y) + z = x + (y + z)$
- 3) $\forall x \in L$ существует единственный $\theta \in L$ такой, что $x + \theta = x$
- 4) $\forall x \in L,\ \exists\ -x \in L$ -единственный, такой, что $x + (-x) = \theta$
- 5) $\forall x \in L$ и $\forall \alpha, \beta \in R$ $(\alpha + \beta)x = \alpha x + \beta x$
- 6) $\alpha(x + y) = \alpha x + \alpha y$
- 7) $(\alpha\beta)x = \alpha(\beta x);\quad 1 \cdot x = x;\quad 0 \cdot x = \theta$

Линейные нормированные пространства.

- Линейное пространство *L* называется ***нормированным***, если $\forall x \in L$ введена ***норма*** $\|x\|$:

1) $\|x\| \geq 0$ - вещественное число $\forall x \in L: \|x\| = 0 \Leftrightarrow x = \theta \in L$

2) $\|\lambda x\| = |\lambda| \|x\|$ где λ - вещественное число

3) $\forall x, y \in L$ $\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|$

- Всякое нормированное пространство – метрическое. Метрика может быть введена следующим образом: $\rho(x, y) = \|x - y\|$
- В линейном метрическом пространстве норма – расстояние до нулевого элемента.

Сходящиеся и фундаментальные последовательности, открытые и замкнутые шары. Полные метрические пространства.

- Последовательность элементов метрического пространства x_n называется ***сходящейся*** (по метрике) к элементу x, если

$$\rho(x_n, x) \to 0,\ n \to \infty$$

- Последовательность x_n называется ***фундаментальной***, если $\forall \varepsilon > 0$ найдется такое $N(\varepsilon)$, что $\rho(x_n, x_m) < \varepsilon$ при всех $n, m > N$
- Метрическое пространство называется **полным**, если любая фундаментальная последовательность его элементов сходится к элементу того же пространства.
- Открытым (замкнутым) ***шаром*** с центром в точке x_0 и радиусом r назовем множество точек метрического пространства , для которых

$$\rho(x, x_0) < r \quad (\rho(x, x_0) \le r)$$

- ε- ***окрестность элемента*** - шар с центром в этой точке и радиусом ε

Примеры полных метрических пространств

1. R – множество вещественных чисел.

$$\rho(x,y)=|x-y| \quad \text{и} \quad \|x\|=|x|$$

2. R^n - пространство векторов с вещественными координатами

а) $$\rho_E(x,y)=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}(x_i-y_i)^2}, \quad \|x\|_E=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}x_i^{\,2}}$$

б) $$\rho_1(x,y)=\sum_{i=1}^{n}|x_i-y_i|, \quad \|x\|=\sum_{i=1}^{n}|x_i|$$

в) $$\rho_\infty(x,y)=\max_{1\le i\le n}|x_i-y_i|, \quad \|x\|=\max_{1\le i\le n}|x_i|$$

3. *C* [*a*, *b*] – множество функций непрерывных на [*a*, *b*]

$$\rho(f,g)=\max_{a\le x\le b}|f(x)-g(x)|$$

Примеры метрических пространств

4. $L_2\,[a,\ b\,]$ – множество функций интегрируемых с квадратом на $[a,\ b]$ (неполное пространство)

$$\rho(f, g) = \left(\int_a^b (f(x) - g(x))^2\right)^{1/2}$$

5. Пространство квадратных матриц размера *n.*

Норма матрицы согласована с нормой вектора, если $\|A\,x\| \le \|A\| \cdot \|x\|$

а) $\|A\|_1 = \max\limits_{1 \le j \le n} \sum\limits_{i=1}^{m} |a_{ij}|$, согласована с $\|X\|_1$

б) $\|A\|_\infty = \max\limits_{1 \le i \le n} \sum\limits_{j=1}^{n} |a_{ij}|$, согласована с $\|X\|_\infty$

Элементы общей теории погрешностей и компьютерной арифметики. Основные определения, утверждения, примеры

- Точность решения задачи оценивается ***абсолютной*** или ***относительной погрешностью***.
- ***Абсолютная погрешность:***

$$\rho(x, x^*) \leq \Delta$$

где x^* - точное решение,

x - численное решение.

- ***Относительная погрешность:*** $\delta = \dfrac{\Delta}{\|x\|}$

- Полная погрешность вычислений состоит из двух составляющих:

1) неустранимая погрешность; 2) устранимая погрешность.

Элементы общей теории погрешностей и компьютерной арифметики. Основные определения, утверждения, примеры

- ***Неустранимая погрешность*** обусловлена неточностью исходных данных (модели и ее параметров) и никаким образом не может быть уменьшена в процессе вычислений.
- ***Устранимая погрешность*** состоит из двух составляющих:
- а) погрешность аппроксимации (метода);
- б) вычислительная погрешность (погрешность округления).
- Эти составляющие могут быть уменьшены выбором более точных методов и увеличением разрядности вычислений.
- Задача вычисления $y = A(x)$ называется ***корректно поставленной***, если для любых входных данных из некоторого класса решение задачи существует, единственно и устойчиво по входным данным (т. е. непрерывно зависит от входных данных задачи).

Элементы общей теории погрешностей и компьютерной арифметики. Основные определения, утверждения, примеры

- Пусть решение *y,* соответствует входным данным *x.* Реально мы имеем возмущенные входные данные с погрешностью δx, т.е. $x + \delta x$ и находим возмущенное решение: $y + \delta y = A(x+\delta x)$.

Эта погрешность входных данных порождает ***неустранимую*** погрешность решения: $\delta y = A(x+\delta x) - A(x)$.

Если решение непрерывно зависит от входных данных, то $\|\delta y\| \to 0$ всегда при $\|\delta x\| \to 0$ и задача устойчива по входным данным.

- Если небольшая погрешность в исходных данных влечет большую погрешность в решении – то задача ***плохо обусловлена .***

Элементы общей теории погрешностей и компьютерной арифметики. Основные определения, утверждения, примеры

- Рассмотрим подробнее погрешность округления чисел, участвующих в вычислениях. В позиционной системе счисления с основанием *r* запись

$$a = \pm a_n a_{n-1} \ldots a_0 , a_{-1} a_{-2} \ldots$$

означает, что
$$a = \pm(a_n r^n + a_{n-1} r^{n-1} + \ldots + a_0 r^0 + a_{-1} r^{-1} + a_{-2} r^{-2} + \ldots)$$

- Здесь *r* – целое число, большее единицы. Каждое из чисел может принимать одно из значений {0, 1, …, r-1}. Числа называются *разрядами.* Эта запись вещественного числа называется также его представлением в форме ***числа с фиксированной запятой.***

Элементы общей теории погрешностей и компьютерной арифметики. Основные определения, утверждения, примеры

- В ЭВМ чаще всего используется представление ***чисел в форме с плавающей запятой.*** Так как наиболее часто в компьютерах применяется двоичная система с плавающей запятой, то вещественное число можно представить виде

$$a = \pm 2^p \sum_{k=1}^{t} \alpha_k 2^{-k} = \pm 2^p (\alpha_1 \ldots \alpha_t), \qquad (|p| \le p_0), \quad \alpha_1 = 1.$$

Здесь *p* - целое число и называется *порядком* числа *a*,

$(\alpha_1 \ldots \alpha_t)$ - *мантисса*

Ограничения на порядки чисел, представляемых в ЭВМ , порой приводят к прекращению вычислений (так называемое *исчезновение порядка*); в других случаях относительно небольшая разрядность представления чисел в ЭВМ приводит к недопустимому искажению результата вычислительной погрешностью.

Примеры

- **Пример 1.** Необходимо отыскать минимальный корень уравнения. Вычисления производим в десятичной системе счисления, причем в числе после округления оставляем четыре действующие цифры (разряда):

$$x^2 - 140x + 1 = 0;$$
$$x = 70 - \sqrt{4899};$$
$$\sqrt{4899} = 69.992 \approx 69.99;$$
$$x = 70 - 69.99 = 0.01.$$

- Рассмотрим другой алгоритм вычисления корня, для чего избавимся от иррациональности в числителе

$$x = 1/(70 + \sqrt{4899});$$
$$70 + 69.99 \approx 140.0;$$
$$x = 1/140 = 0.00714285 \approx 0.007143.$$

Примеры

- Как видно из сравнения полученных результатов, применение "неудачного" алгоритма завышает результат на 30 %. Это явление в практике вычислений называется ***потерей значащих цифр***, и часто наблюдается при вычитании близких величин. Потеря значащих цифр, например, довольно часто приводит к существенному искажению результатов при решении даже сравнительно небольших систем линейных алгебраических уравнений.

Примеры

Пример 2

Требуется вычислить: $c = 0,476 + 0,411 + 1,47 + 26,2 + 83.$

Сложим эти числа столбиком и, округлив результат до 3-х значащих цифр, получим значение с:

0,476
0,411
1,47
26,2
83,

111,557 ≈ **112**.

ЭВМ выполняет действия поочередно (складывает пару чисел) и округляет результат после каждого действия.

Выполним суммирование слева направо в порядке записи (как ЭВМ):

+ 0,476	+ 0,887	+ 2,36	+ 28,6
0,411	1,47	26,2	83,
0,887 ≈ 0,887	2,357≈2,36	28,56 ≈28,6	111,6 ≈ **112.**

Примеры

Пусть теперь выражение записано в обратном порядке:
Выполним суммирование как ЭВМ:

+ 83	+ 109	+ 110	+ 110
26,2	1,47	0,411	0,476
109,2 ≈ 109	110,47 ≈ 110	110,411 ≈ 110	110,476 ≈ **110**

От перестановки слагаемых сумма изменилась, то есть

$$\sum_{i=1}^{n} x_i \neq \sum_{i=n}^{1} x_i$$

Погрешности арифметических операций

- Погрешность вычисления функций:

$$y = f(x_1, \dots x_m) \qquad \left| x_i - x_i^* \right| \le \Delta(x_i^*)$$

$$\Delta(y^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i}(x_1^*, \dots, x_n^*) \right| \Delta(x_i^*)$$

$$y = f(x_1,\ x_2) = x_1 \pm\ x_2$$

$$\Delta(y^*) = \Delta(x_1^*) + \Delta(x_2^*)$$

$$\boxed{\begin{gathered} y = f(x_1,\ x_2) = x_1 -\ x_2 \\ \partial(y^*) = \frac{\Delta(x_1^*) + \Delta(x_2^*)}{\left| x_1^* -\ x_2^* \right|} \end{gathered}}$$

Рекомендации для снижения ошибок округления:

- **В машинной арифметике законы коммутативности (**переместительный**) и дистрибутивности (**распределительный**) не всегда соблюдаются.**
- При сложении и вычитании последовательности чисел действия необходимо начинать с наименьших по абсолютной величине значений.
- Следует избегать вычитания двух близких чисел, преобразуя выражения.
- Количество арифметических действий для решения задачи нужно сводить к минимуму.
- Для уменьшения ошибки округления расчеты следует проводить с повышенной разрядностью

При выборе численного метода решения задачи необходимо учитывать следующее

- Погрешность метода должна быть на порядок меньше неустранимой погрешности. Увеличение погрешности метода снижает точность, уменьшение – увеличивает время решения задачи.
- Погрешность округления должна быть значительно меньше (на два порядка) погрешности метода и неустранимой погрешности

Для оценки погрешности решения на практике можно использовать следующие приемы:

- Решить задачу различными численными методами и результаты сравнить.
- Незначительно изменить исходные данные и повторно решить задачу. Результаты сравнить. Если они различаются сильно, задача или метод ее решения являются ***неустойчивым*** – выбрать другой.

Прямые и итерационные методы и алгоритмы решения математических задач

- Прямые и итерационные методы решения математических задач. Основные определения
- Преимущества, недостатки и особенности реализации

Прямые (точные) численные методы и алгоритмы

- Решение будет получено за конечное число шагов;
- Количество шагов и процедура вычисления на каждом шаге строго определены.
- Если предположить, что вычислительная погрешность равна нулю, то такие методы дали бы **точный** результат.

(Примеры – формулы для решения квадратных уравнений, простейших тригонометрических уравнений).

Итерационные численные методы и алгоритмы

- Решение определяется как предел бесконечной итерационной последовательности;
- Определены правила получения итерационной последовательности (очередной итерации метода) при заданной предыдущей итерации (или нескольких предыдущих итераций);
- Количество шагов, необходимых для вычисления решения с заданной точностью заранее не определено.

Преимущества, недостатки и особенности реализации алгоритмов для прямых методов

Преимущество: В отсутствие вычислительной погрешности дают точный результат.

Недостатки:

- При большом количестве шагов вычислительная погрешность может накапливаться.
- Может потребоваться сохранять большие объемы информации на каждом шаге для хранения промежуточных результатов (<u>ограничение на ресурсы памяти</u>).

Преимущества, недостатки и особенности реализации алгоритмов для прямых методов

Особенности реализации:

- Требуют исследования влияния ошибок округления и, возможно, преобразования формул вычисления.
- **Не используются при большой размерности задачи.**

Преимущества, недостатки и особенности реализации алгоритмов для итерационных методов

Преимущество:
Вычислительная погрешность не накапливается и даже может быть исправлена при очередной итерации.
Недостаток:
Если итерационная последовательность сходится медленно, то для достижения требуемой точности решения может потребоваться слишком большое число шагов (<u>ограничение на ресурсы времени</u>)

Преимущества, недостатки и особенности реализации алгоритмов для итерационных методов

Особенности реализации:

- Выбор начального приближения;
- Выяснение условий сходимости итерационной последовательности;
- Определение условий прекращения итераций (способов оценки погрешности решения на каждой итерации).