Предмет вычислительной математики. Погрешности вычислений. Численное дифференцирование.

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

natalia.zavyalova@gmail.com

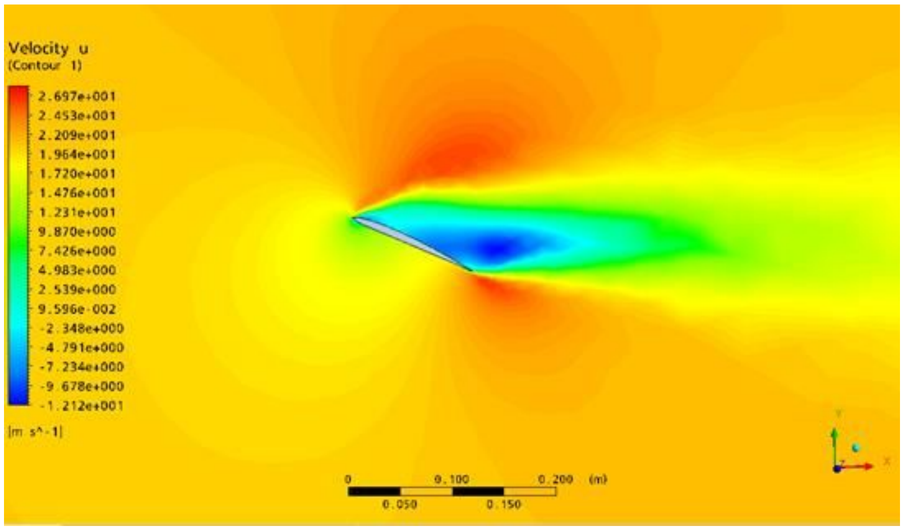
- На данный момент все научно-технические задачи решаются с использованием средств вычислительной математики.
- Ни один реальный объект не может быть внедрен в жизнь без соответствующей системы тестов, основанных на математическом моделировании.
- Современные компьютеры и кластерные системы являются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

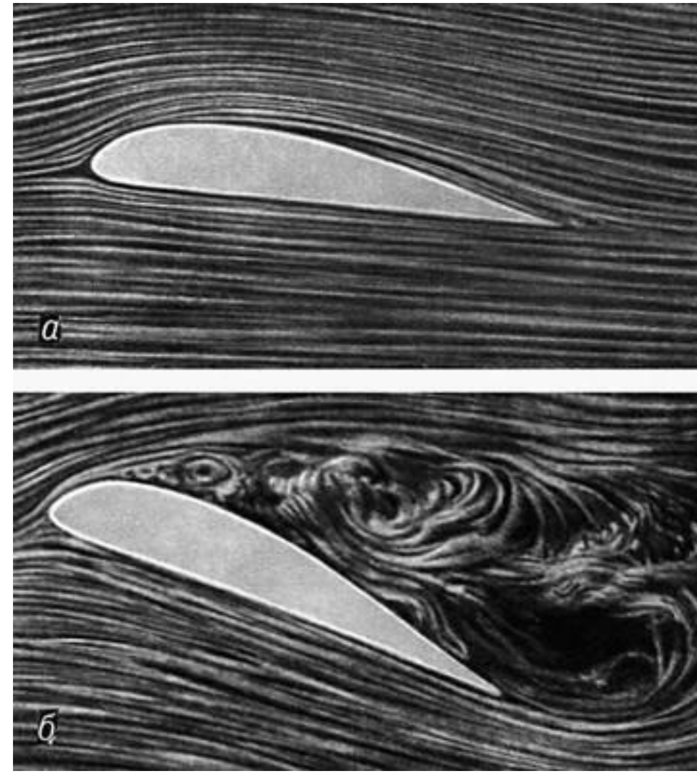
Цели и задачи курса

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

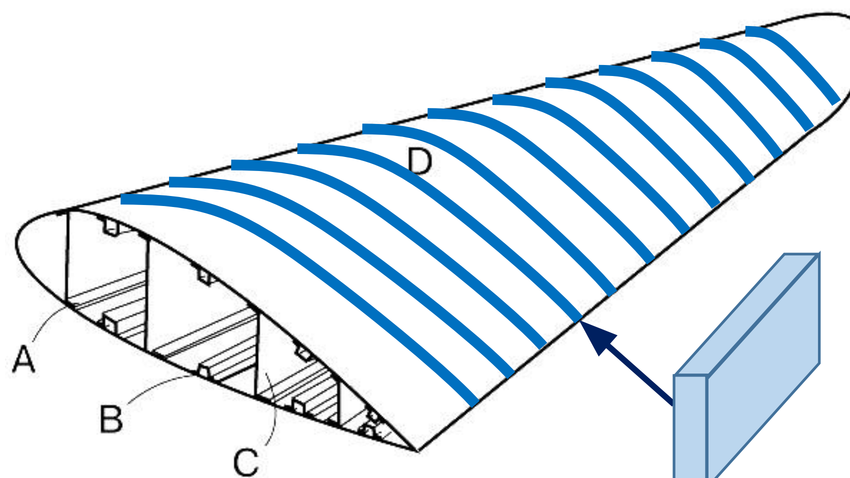
Расчеты аэродинамики

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

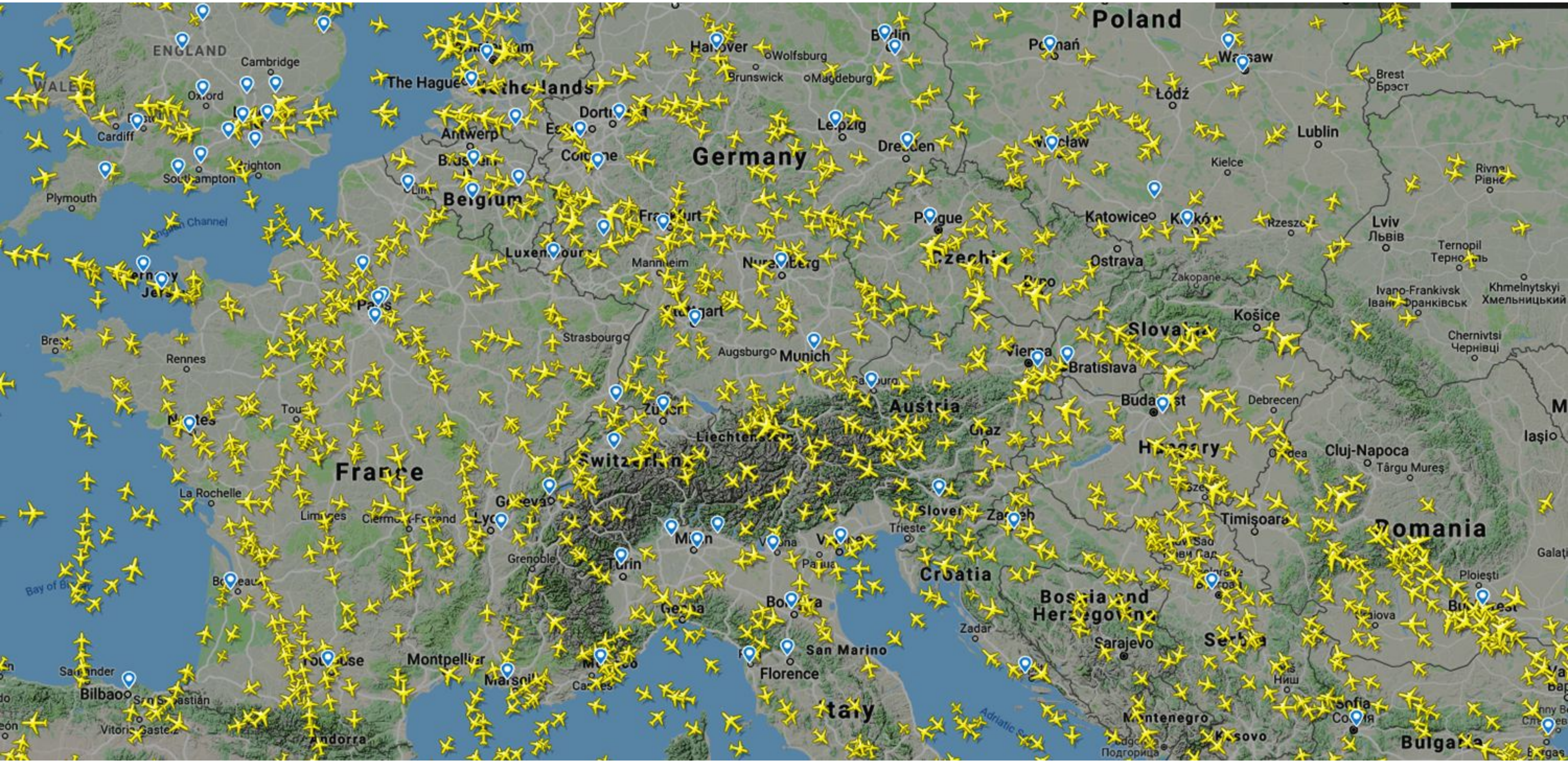




Решение: На крыле параллельно наклеиваются специальные полоски. Итоговая экономия топлива составляет 2%.



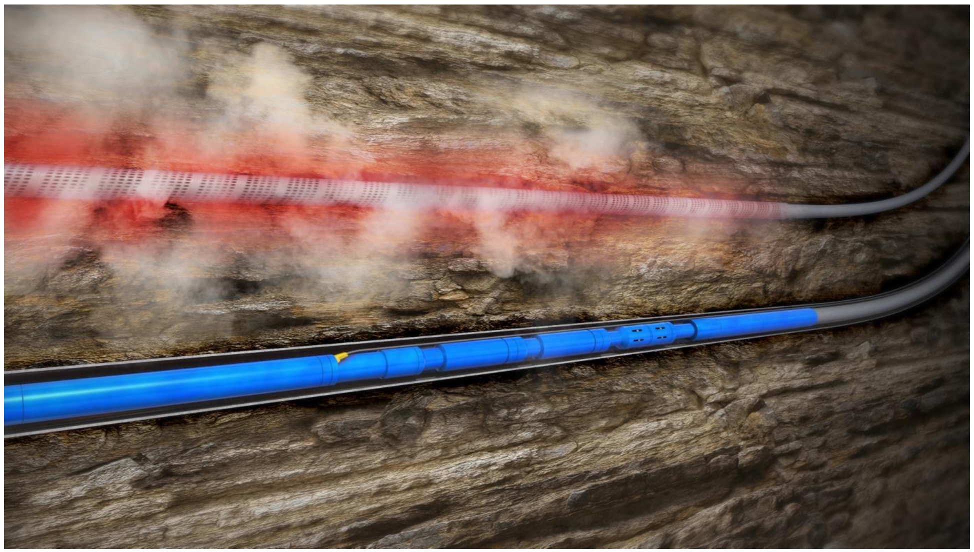
Расчеты аэродинамики

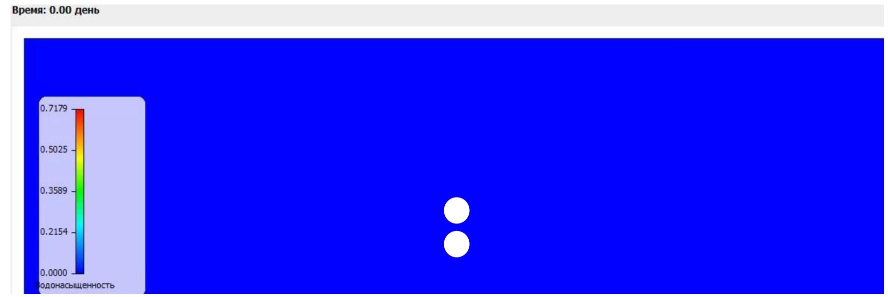


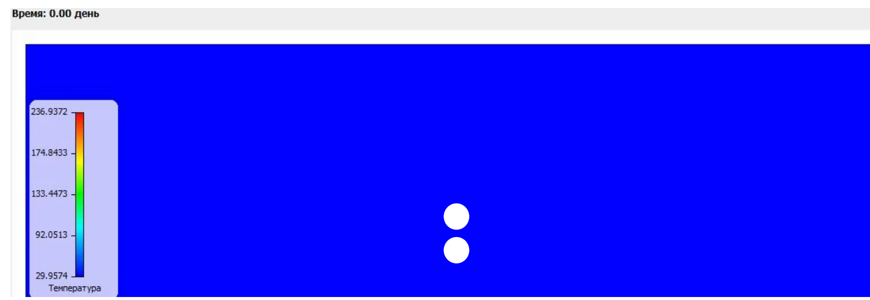
2% в контексте общемировых перелетов приводит к гигантскому экономическому эффекту.

Месторождение высоковязких нефтей

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





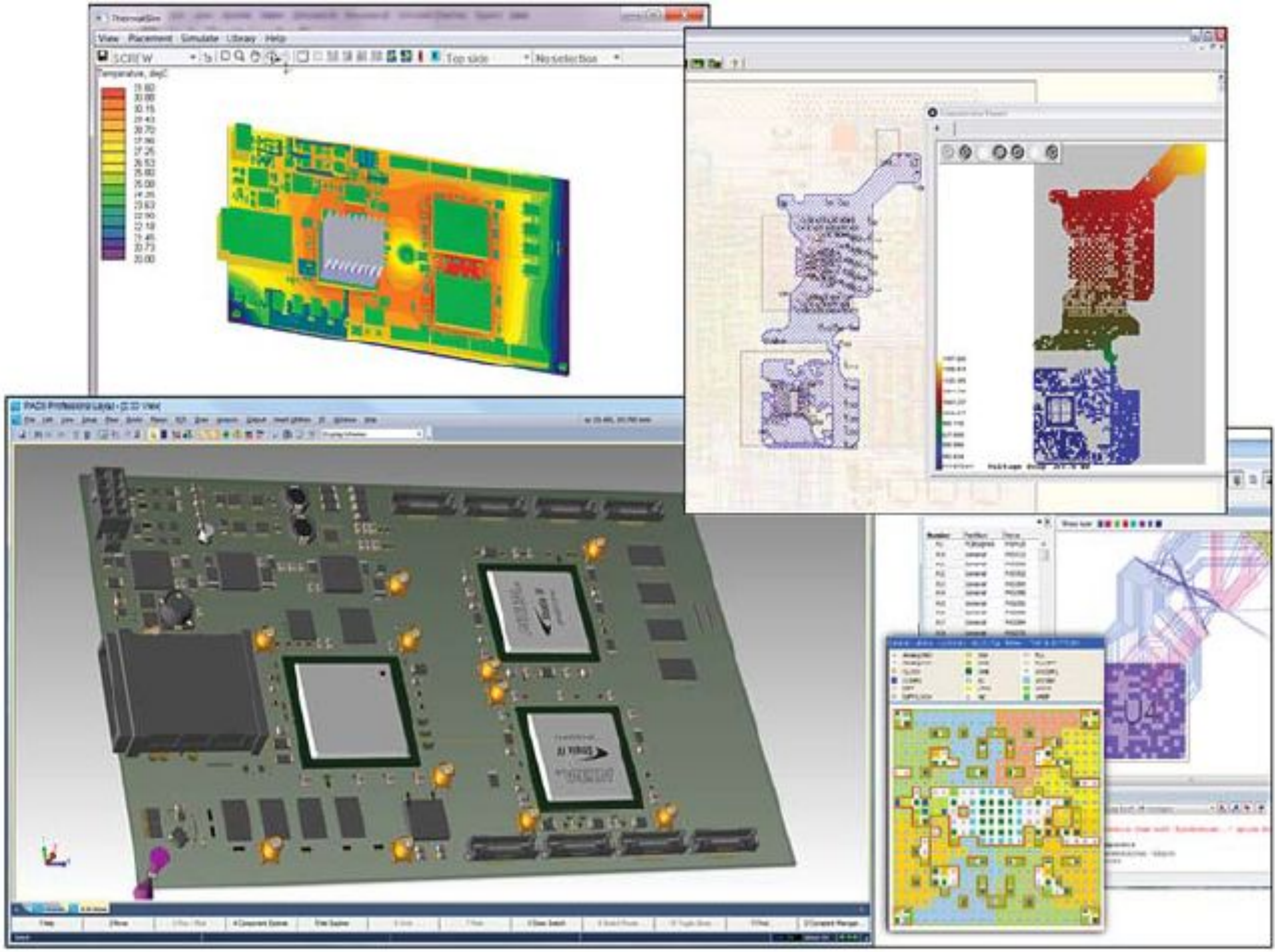


Решение: Было обнаружено, что нефть обладает не Ньютоновской реологией. Эти свойства были заложены в модель, что позволило оценить рентабельность разработки месторождения.

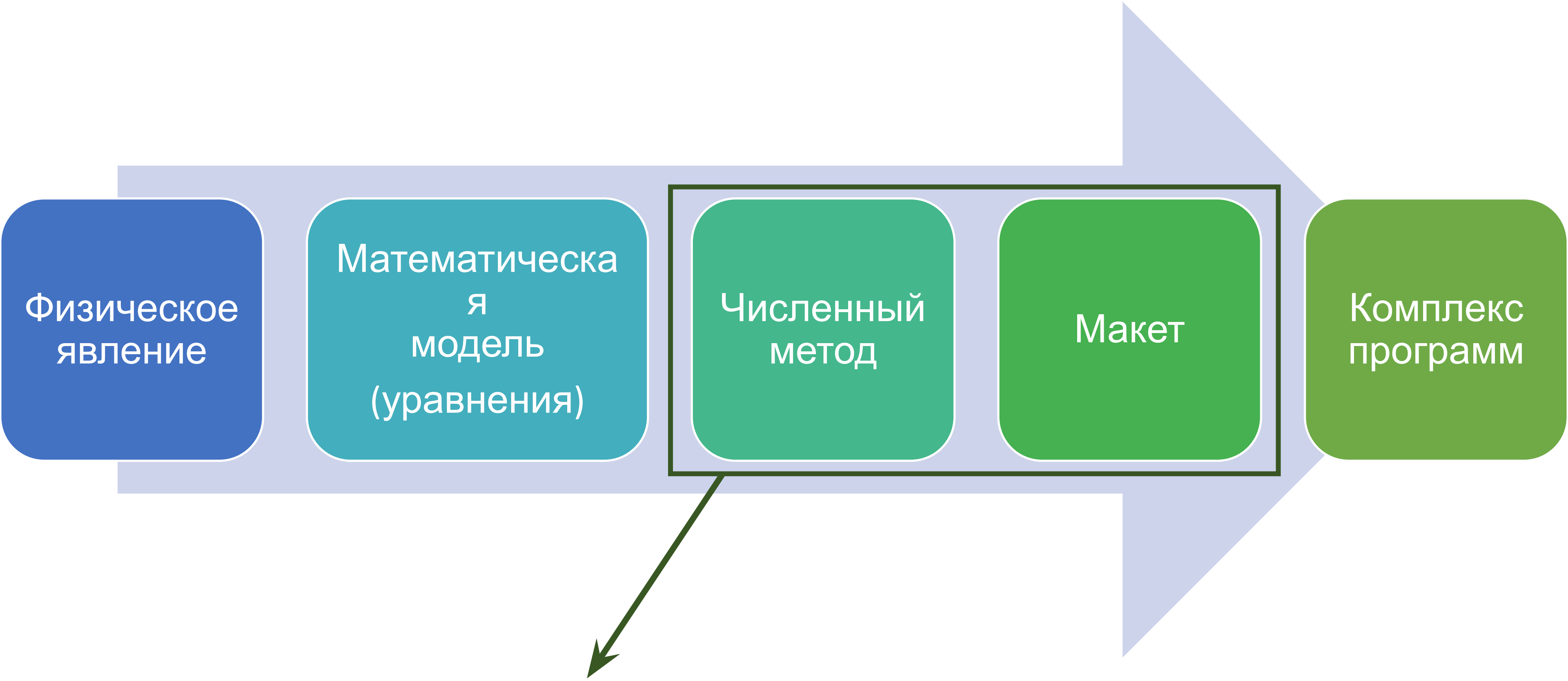
Создание новых электронных систем

Разработка новых электронных систем включает:

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



Организация проекта по моделированию

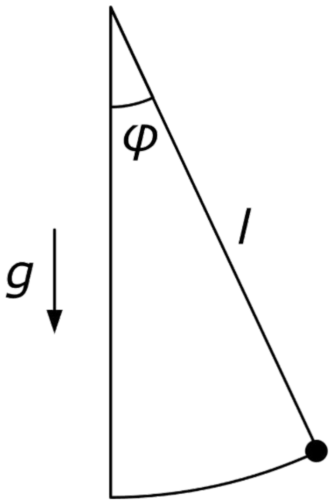


- Погрешности вычислений
- Численное дифференцирование, интегрирование, интерполяция
- Решение нелинейных уравнений
- Решение обыкновенных дифференциальных уравнений
- Решение систем линейных алгебраических уравнений
- Методы для задач в частных производных

Погрешности вычислений

Типы погрешностей

Маятник



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

$\boldsymbol{\varphi}^*$ **- точное решение**

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**

$\boldsymbol{\varphi_1}$ **- решение модели**

Неустранимая погрешность

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

Типы погрешностей

Модель: математический маятник

Определение производной в **непрерывном пространстве**

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

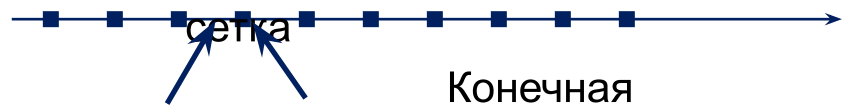
Бесконечно малая величина

$\boldsymbol{\varphi_1}$**- решение модели**

Численная модель

Дискретное пространство

Расчетная сетка



t_i t_{i+1}

Конечная величина $\Delta t = t_{i+1} - t_i$

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

Производная

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

$\boldsymbol{\varphi_2}$**- решение численной модели**

Погрешность метода

$$\Delta_2 = |\boldsymbol{\varphi_1} - \boldsymbol{\varphi_2}|$$

Типы погрешностей

Численная модель

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

$\boldsymbol{\varphi_2}$**- 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

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

$\boldsymbol{\varphi_3}$**- решение на компьютере**

Погрешность округления

$\Delta_3 = |\boldsymbol{\varphi_2} - \boldsymbol{\varphi_3}|$

Машинное эпсилон – наибольшее положительное число, для которого: $1 + \varepsilon = 1$

При расчетах с **двойной точностью ε ~ 10^{-16}**

В любой математической операции, выполняемой на компьютере, происходит округление

Итоговая погрешность вычислений:

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

Суммирование ряда Тейлора

Рассмотрим способ вычисления экспоненты, через разложение в ряд Тейлора

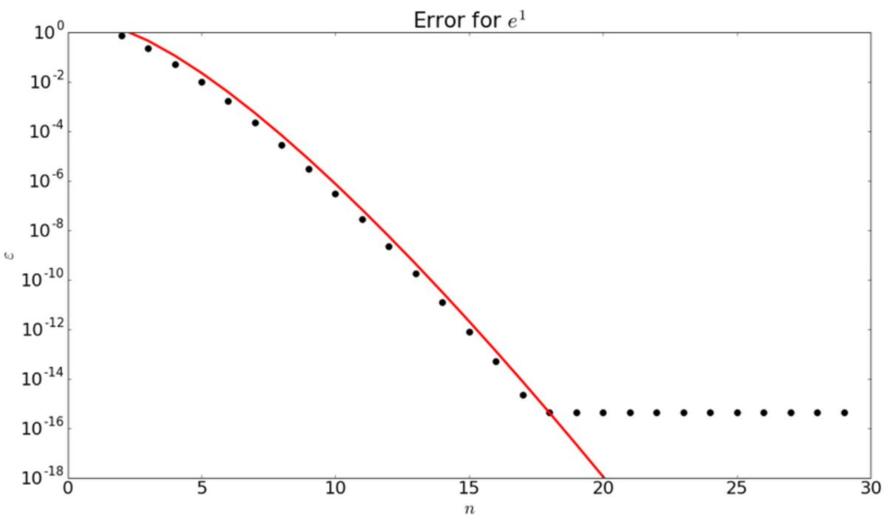
$$e^x \approx 1 + x + x^2 + \cdots = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^k}{k!} = S_n$$

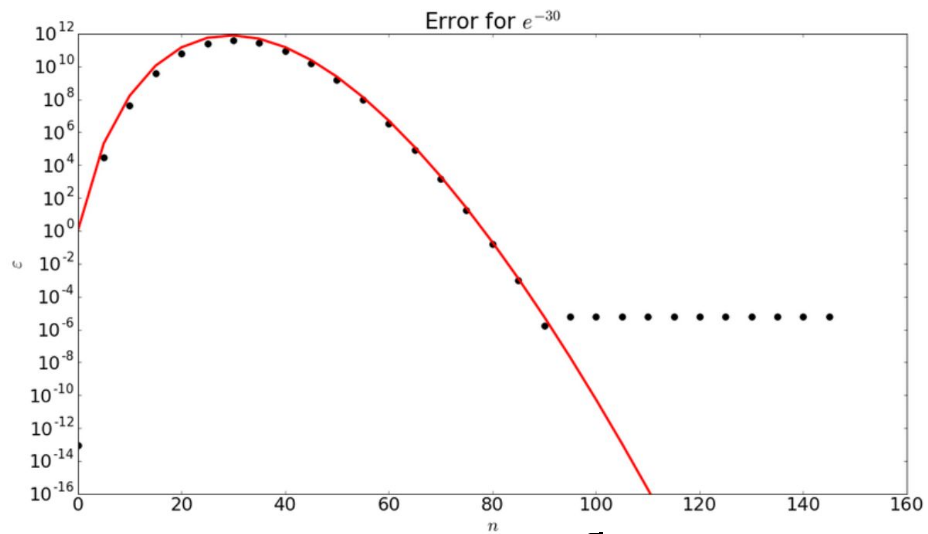
n – параметр метода

Оценим ошибку через формулу Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа

$$e^x \approx 1 + x + x^2 + \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + e^{\xi}\frac{|x|^n}{n!} \qquad |e^x - S_n| \le \max(1, e^{\xi})\frac{|x|^n}{n!} \equiv \Delta_{\text{метод}}$$

При $n \to \infty$ 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

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

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

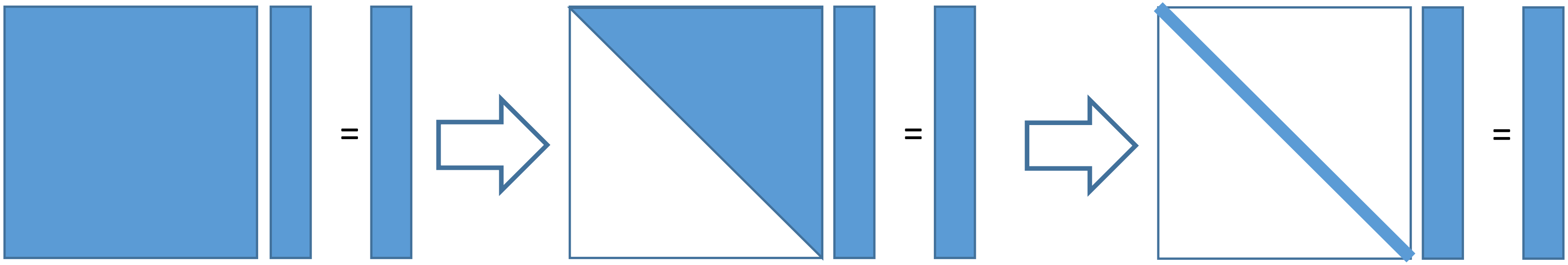
N	5	10	20	50	100	500
Err1	$-1.78 \cdot 10^{3}$	24.99	$6.62 \cdot 10^{-9}$	$2.73 \cdot 10^{-14}$	$2.73 \cdot 10^{-14}$	NAN
Err2	$-1.14 \cdot 10^{-10}$	$2.22 \cdot 10^{-16}$	$2.22 \cdot 10^{-16}$	$2.22 \cdot 10^{-16}$	$2.22 \cdot 10^{-16}$	$2.22 \cdot 10^{-16}$

Алгоритм вычисления решения системы уравнений

Метод Гаусса

Прямой ход

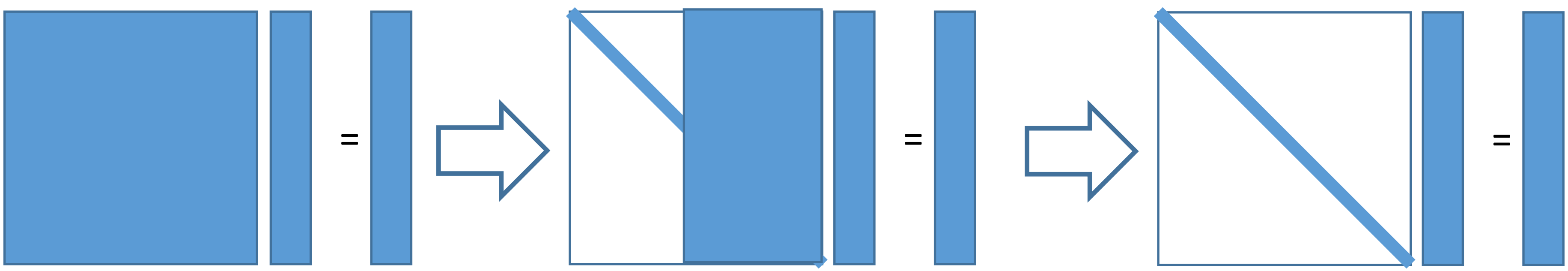
Обратный ход



Начало:

$$\left.\begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{matrix}\right| \begin{matrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{matrix} \sim \left.\begin{matrix} 1 & a_{12}/a_{11} & a_{13}/a_{11} \\ 0 & a_{22} - a_{21}\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & a_{23} - a_{21}\dfrac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{32} - a_{31}\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & a_{33} - a_{31}\dfrac{a_{13}}{a_{11}} \end{matrix}\right| \begin{matrix} b_1/a_{11} \\ b_2 - a_{21}\dfrac{b_1}{a_{11}} \\ b_3 - a_{31}\dfrac{b_1}{a_{11}} \end{matrix} \sim \left.\begin{matrix} 1 & \widehat{a_{12}} & \widehat{a_{13}} \\ 0 & 1 & \widehat{a_{23}} \\ 0 & 0 & \widehat{a_{33}} \end{matrix}\right| \begin{matrix} \widehat{b_1} \\ \widehat{b_2} \\ \widehat{b_3} \end{matrix} \quad \ldots$$

Метод Гаусса-Жордана (с выбором главного элемента)

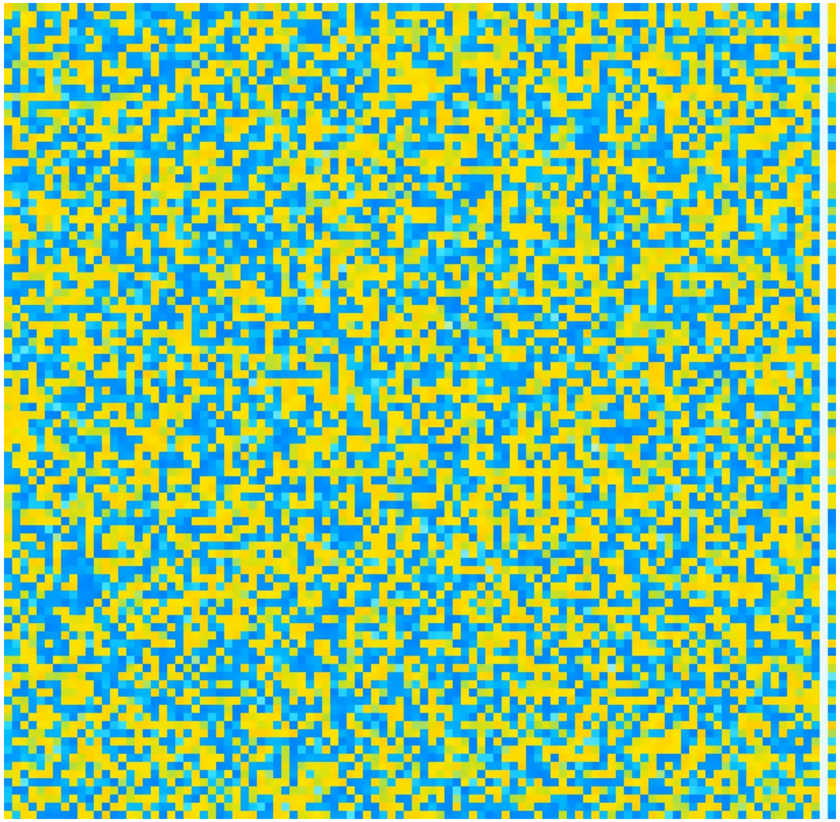


$$\left.\begin{matrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{matrix}\right| \begin{matrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{matrix} \sim \left.\begin{matrix} 1 & a_{12}/a_{11} & a_{13}/a_{11} \\ 0 & a_{22} - a_{21}\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & a_{23} - a_{21}\dfrac{a_{13}}{a_{11}} \\ 0 & a_{32} - a_{31}\dfrac{a_{12}}{a_{11}} & a_{33} - a_{31}\dfrac{a_{13}}{a_{11}} \end{matrix}\right| \begin{matrix} b_1/a_{11} \\ b_2 - a_{21}\dfrac{b_1}{a_{11}} \\ b_3 - a_{31}\dfrac{b_1}{a_{11}} \end{matrix} \sim \left.\begin{matrix} 1 & 0 & \widehat{a_{13}} \\ 0 & 1 & \widehat{a_{23}} \\ 0 & 0 & \widehat{a_{33}} \end{matrix}\right| \begin{matrix} \widehat{b_1} \\ \widehat{b_2} \\ \widehat{b_3} \end{matrix} \quad \ldots$$

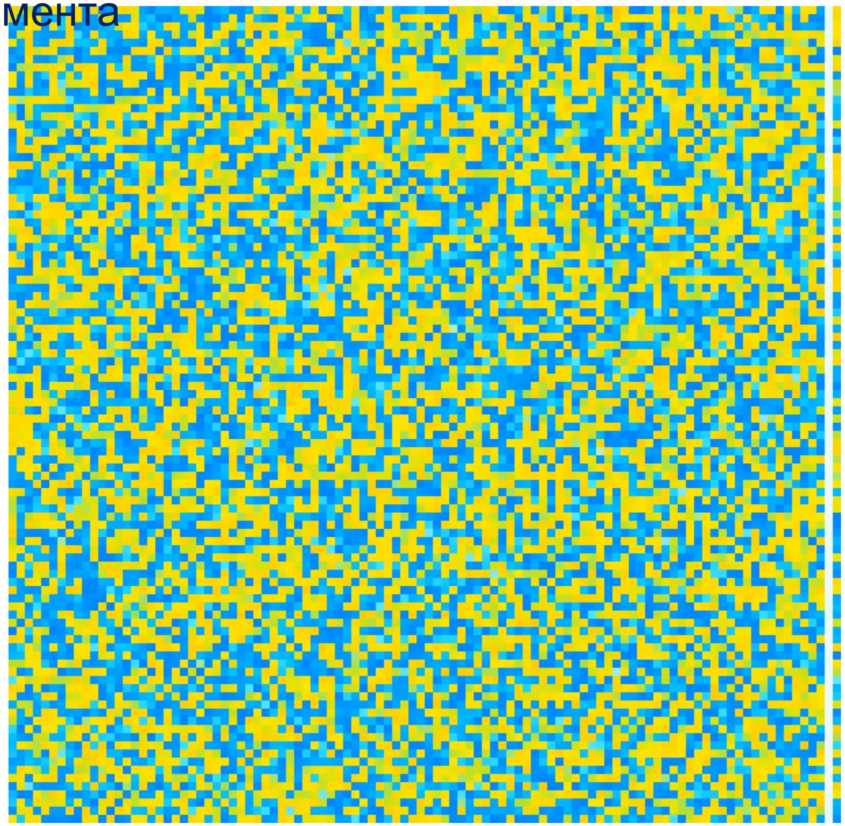
Алгоритм вычисления решения системы уравнений

Для теста использовалась матрица 100 x 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 величичны 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

$$\Delta\left(\pm a_1^* \pm a_2^* \pm \ldots \pm a_n^*\right) = \Delta\left(a_1^*\right) + \Delta\left(a_2^*\right) + \ldots + \Delta\left(a_n^*\right)$$

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

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

Численное дифференцирование

Вычисление первой производной

Пространство непрерывных функций

x - непрерывная область определения функции

$f(x)$ - непрерывная область определения функции

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

Пространство дискретных функций

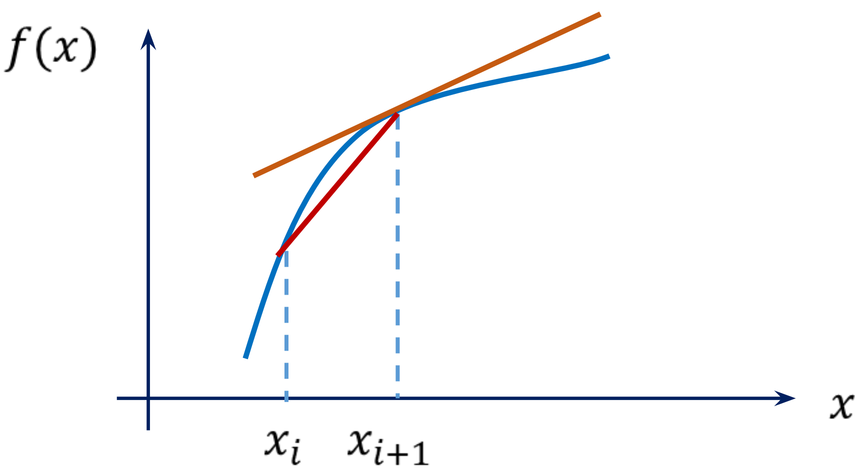
$\{x\}_{i=0}^{N}$ - набор точек- расчетная сетка

$x_{i+1} - x_i = h$ - 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

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

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

$$\lim_{x \to 0} \frac{o(x)}{x} = 0 \qquad \lim_{x \to 0} \frac{O(x)}{x} = const$$

Главный член погрешности

Метод **первого** порядка аппроксимации

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

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

$$\Delta_{\text{метод}} \leq \frac{h}{2} M_2$$

Точное значение производной

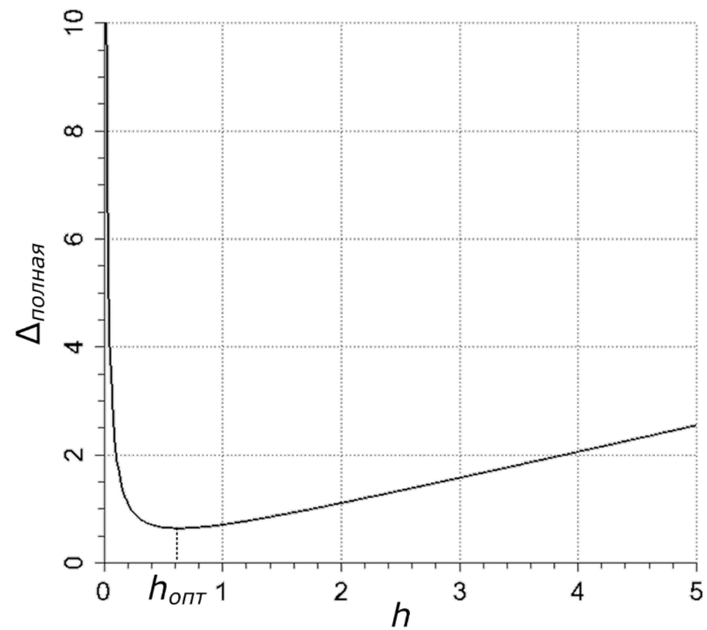
Погрешность метода

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

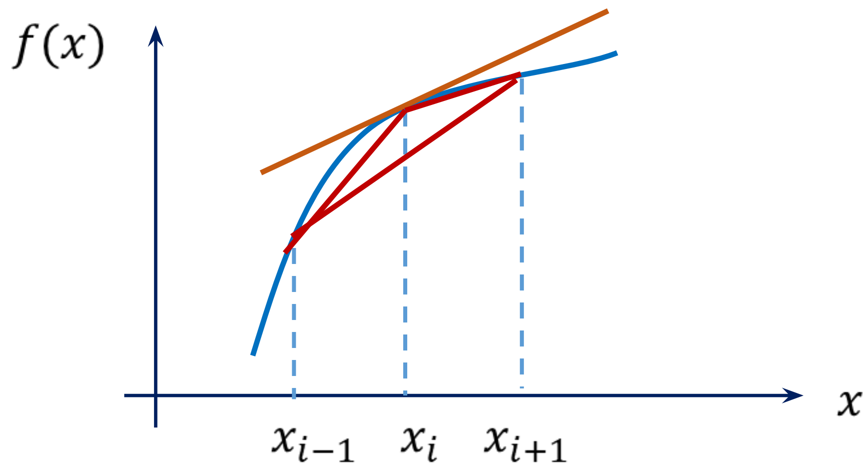
$$(\Delta_{\text{полная}})'_h = \frac{1}{2} M_2 - \frac{2\delta}{h^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad h_{\text{опт}} = 2\sqrt{\frac{\delta}{M_2}}$$

Оптимальный шаг численного дифференцирования

Другие формулы численного дифференцирования

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

$$\frac{df}{dx}_{\text{числ}3} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h}$$



$$f_{i\pm1} = f(x_{i\pm1}) = f(x_i \pm h) = f_i \pm f_i'h + f_i''\frac{h^2}{2!} \pm f_i'''\frac{h^3}{3!} + O(h^3)$$

I порядок

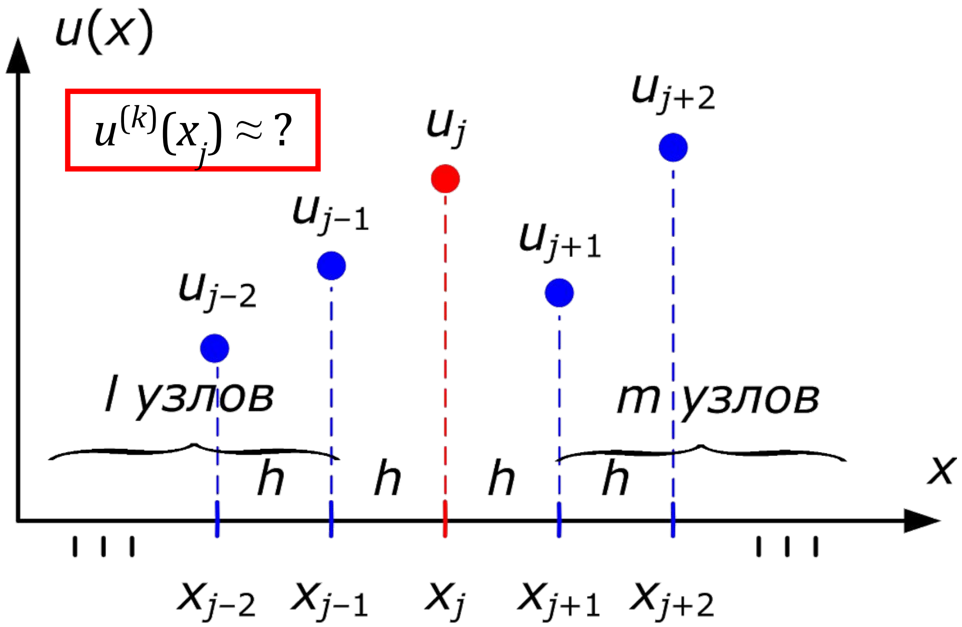
$$\frac{df}{dx}_{\text{числ}2} = \frac{f_i - f_{i-1}}{h} = \frac{f_i - (f_i - f_i'h + f_i''\frac{h^2}{2!} + O(h^3))}{h} = f_i' + f_i''\frac{h}{2!} + O(h^2))$$

$$\frac{df}{dx}_{\text{числ}3} = \frac{f_{i+1} - f_{i-1}}{2h} = \frac{(f_i + f_i'h + f_i''\frac{h^2}{2!} + f_i'''\frac{h^3}{3!} - (f_i - f_i'h + f_i''\frac{h^2}{2!} - f_i'''\frac{h^3}{3!} + O(h^3))}{2h}$$

$$= f_i' + f_i'''\frac{h^2}{6} + O(h^3))$$

II порядок

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: $k = 1$

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

Производные в точке x_j

Тогда

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

Метод неопределенных коэффициентов

$$0 \cdot u_j + 1 \cdot u_j' + 0 \cdot u_j'' + 0 \cdot u_j''' = \frac{1}{h} u_j \sum_{i=-l}^{m} \alpha_i + u'_j \sum_{i=-l}^{m} i\alpha_i + \frac{h^2}{2} u''_j \sum_{i=-l}^{m} i^2\alpha_i + \frac{h^3}{6} u'''_j \sum_{i=-l}^{m} i^3\alpha_i$$

Приравниваем коэффициенты при соответствующих степенях производных

$$\begin{cases} 0 = \sum_{i=-l}^{m} \alpha_i \\ 1 = \sum_{i=-l}^{m} i\alpha_i \\ 0 = \sum_{i=-l}^{m} i^2\alpha_i \\ 0 = \sum_{i=-l}^{m} i^3\alpha_i \\ \vdots \end{cases}$$

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

Число неизвестных равно числу уравнения при условии

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

Остаточный член имеет n-й порядок аппроксимации

Разрешимость полученной системы уравнений

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

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

Определитель матрицы А – детерминант Вандермонда. В случаях различия всех узлов

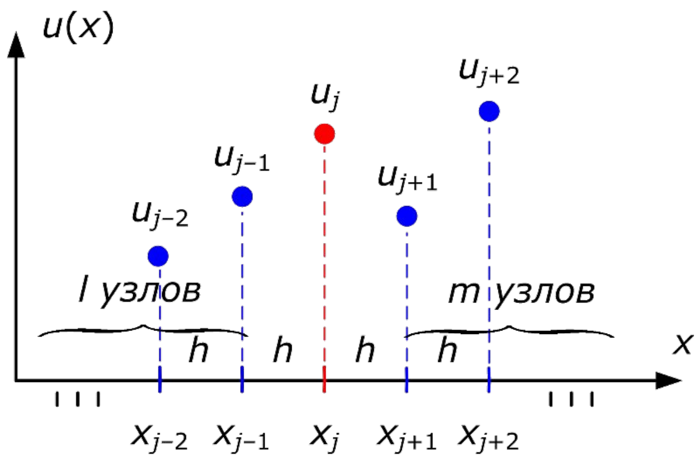
Шаблона $\det A \neq 0$ и, значит, существует единственное решение системы – набор коэффициентов.

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

$$\Updownarrow$$

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

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 $\alpha_i = \alpha_{-i}$.

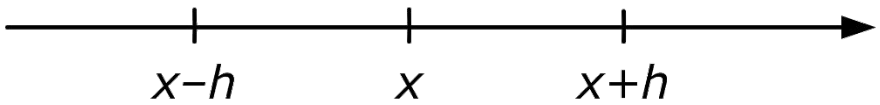
При нечетных k дополнительного порядка не будет, но справедливо $\alpha_i = -\alpha_{-i}, \alpha_i = 0$

Использование метода неопределенных коэффициентов

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

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

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



[redacted]

[redacted]

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

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

Первая производная

[redacted]

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

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

Вторая производная

[redacted]

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

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

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.

Спасибо за внимание!