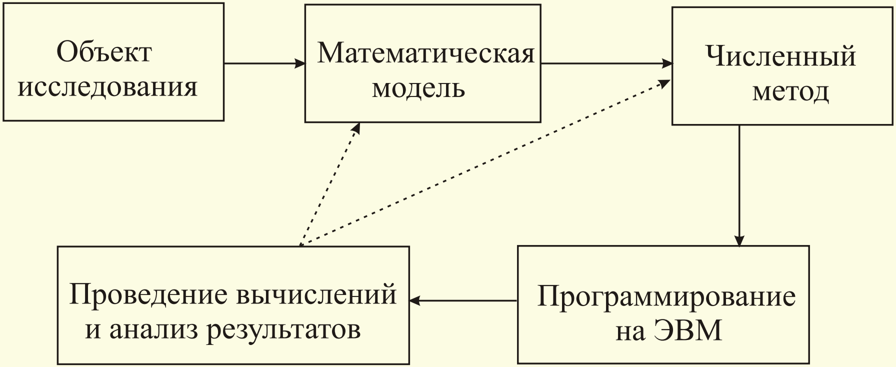
ЛЕКЦИИ ПО ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКЕ

Е. С. Тверская

МГТУ им. Н.Э. Баумана
Москва

ЛЕКЦИЯ 1.1

Схема анализа изучаемого процесса методами математического моделирования



Математическое моделирование представляет собой метод исследования объектов и процессов, проходящих в различных сферах человеческой деятельности при помощи их приближенного описания на математическом языке. Для этого формулируются основные законы, которым подчиняется объект исследования и строится **математическая модель**.

Математическая модель представляет собой запись этих законов в виде систем уравнений (алгебраических, дифференциальных, интегральных и т. д.).

Основные типы решаемых задач

Типы данных входящие в математическую модель.

- Входные данные.
- Параметры модели.
- Выходные данные

Прямая задача. По известным значениям входных данных и фиксированных значениях параметров математической модели требуется найти решение (выходные данные).

Обратная задача. По известным значениям выходных данных, т. е. известно решение, и фиксированных значениях параметров математической модели нужно определить значения входных данных, т. е. причины, которые вызвали уже известное следствие.

Задача идентификации. Задача выбора из параметрического семейства математических моделей (выбора параметра модели) той, которая оптимально, в смысле некоторого критерия, согласует выходные данные с результатами наблюдений.

Погрешности результата численного решения задачи

Неустранимые погрешности. Так как математическая модель изучаемого процесса носит лишь приближенный характер, что связано с упрощением исходного явления (не учитываются факторы, оказывающие незначительное влияние на изучаемый процесс), то по отношению к численному методу, данные погрешности являются неустранимыми.

Погрешности метода. Эти погрешности возникают при переходе от математической модели к численному методу, так как данные методы являются приближенными.

Вычислительные погрешности. Возникают в связи с точностью представления вещественных чисел на ЭВМ при вводе данных или при проведении арифметических операций.

ЛЕКЦИЯ 2

Абсолютная и относительная погрешности

x - точное значение некоторой величины

x^* - приближенное значение величины x

Определение. **Ошибкой** или **погрешностью** приближенного числа x^* называют разность $x - x^*$ между точным и приближенным значениями.

Определение. **Абсолютной погрешностью** называется величина:

$$\Delta\left(x^*\right) = \left|x - x^*\right|.$$

Определение. **Относительной погрешностью** величины x^* при апроксимации ненулевой величины x называется величина

$$\delta\left(x^*\right) = \frac{\left|x - x^*\right|}{|x|} = \frac{\Delta\left(x^*\right)}{|x|}.$$

На практике

$$|x - x^*| \leqslant \overline{\Delta}(x^*), \qquad \frac{|x - x^*|}{|x|} \leqslant \overline{\delta}(x^*),$$

$$\overline{\delta}(x^*) \approx \frac{\overline{\Delta}(x^*)}{|x^*|}; \quad \overline{\Delta}(x^*) \approx |x^*|\,\overline{\delta}(x^*).$$

$\overline{\Delta}(x^*)$ и $\overline{\delta}(x^*)$ – **верхними границами** абсолютной и относительной погрешностей.

Правила записи приближенных чисел

Определение. **Значащими цифрами** числа называют все цифры в его записи, начиная с первой ненулевой слева.

Определение. Значащую цифру числа x^* называют **верной**, если абсолютная погрешность числа не превосходит единицы разряда, соответствующего этой цифре.

Погрешности округления

Округление усечением.

Отбрасывание всех цифр, расположенных справа от n-ой значащей цифры.

Абсолютная величина погрешности при таком округлении не превышает единицы разряда, соответствующего последней оставляемой цифре.

Округление по дополнению.

Если первая слева из отбрасываемых цифр меньше 5, то сохраняемые цифры остаются без изменения. Если же она больше или равна 5, то в младший сохраняемый разряд добавляется единица.

Абсолютная величина погрешности при таком округлении не превышает половины единицы разряда, соответствующего последней оставляемой цифре.

Некоторые особенности машинной арифметики

• На ЭВМ можно хранить лишь конечное число значащих цифр числа (из-за конечности разрядной сетки). Следовательно, на ЭВМ представим конечный набор действительных чисел.

Указанное представление действительных чисел в ЭВМ называется представлением с **плавающей запятой** - $x^* = fl(x)$.

• Диапазон изменения чисел в ЭВМ ограничен. Таким образом, для представимых на ЭВМ чисел x имеем $0 < X_0 \leqslant |x| < X_{inf}$. Число X_0 - наименьшее положительное число, представимое на ЭВМ, а X_{inf} - наибольшее.

Последствия представления чисел с плавающей запятой

• Полученное решение верно лишь с машинной точностью.

• В зависимости от машины результат каждой промежуточной арифметической операции либо округляется, либо усекается до машинной точности.

• Определенные элементы алгоритма, например, критерии останова будут зависеть от машинной точности.

Введем характеристику **машинной точности**. Для этого используют понятие **машинного епсилон** ε_m. Для конкретной вычислительной машины оно определяется как наименьшее положительное число ε_m такое, что $\varepsilon_m + 1 > 1$.

Погрешности арифметических операций над приближенными числами

Теорема. **(Об абсолютной погрешности алгебраической суммы)** Абсолютная погрешность алгебраической суммы (разности) на превосходит суммы абсолютных погрешностей слагаемых:

$$\Delta\left(x^* \pm y^*\right) \leqslant \Delta\left(x^*\right) + \Delta\left(y^*\right).$$

Теорема. **(Об относительной погрешности алгебраической суммы)** Пусть x и y – ненулевые числа одного знака. Тогда справедливы неравенства

$$\delta\left(x^* + y^*\right) \leqslant \delta_{\max}; \quad \delta\left(x^* - y^*\right) \leqslant \nu\delta_{\max},$$

где $\delta_{\max} = \max\left\{\delta\left(x^*\right), \delta\left(y^*\right)\right\}$, $\nu = \dfrac{|x+y|}{|x-y|}$

Следствие.

$$\overline{\delta}\left(x^*+y^*\right)=\overline{\delta}_{\max};\quad \overline{\delta}\left(x^*-y^*\right)=\nu\overline{\delta}_{\max},$$

где $\overline{\delta}_{\max}=\max\left\{\overline{\delta}\left(x^*\right),\overline{\delta}\left(y^*\right)\right\}$, $\nu=\dfrac{|x+y|}{|x-y|}$.

Теорема. (Об относительной погрешности произведения и частного) Для относительных погрешностей произведения и частного приближенных чисел верны оценки

$$\delta\left(x^*y^*\right)\leqslant\delta\left(x^*\right)+\delta\left(y^*\right)+\delta\left(x^*\right)\delta\left(y^*\right),$$

$$\delta\left(\frac{x^*}{y^*}\right)\leqslant\frac{\delta\left(x^*\right)+\delta\left(y^*\right)}{1-\delta\left(y^*\right)},\quad \text{где}\quad \delta\left(y^*\right)<1.$$

Следствие. Если $\overline{\delta}\left(x^*\right)\ll 1$ и $\overline{\delta}\left(y^*\right)\ll 1$, то для оценки границ относительных погрешностей можно использовать следующие приближенные равенства:

$$\overline{\delta}\left(x^*y^*\right)\approx\overline{\delta}\left(x^*\right)+\overline{\delta}\left(y^*\right);\quad \overline{\delta}\left(\frac{x^*}{y^*}\right)\approx\overline{\delta}\left(x^*\right)+\overline{\delta}\left(y^*\right).$$

Погрешность функции.

$y = f(x_1, x_2, \ldots, x_n)$ дифференцируемая в области D функция.
Вместо $y = f(x)$, в действительности, вычисляется $y^* = f(x^*)$.

Теорема. Для абсолютной погрешности значения $y^* = f(x^*)$ справедлива следующая оценка:

$$\Delta(y^*) \leqslant \sum_{i=1}^{n} \max_{[x,x^*]} \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right| \Delta(x_i^*).$$

Следствие: Если $x^* \approx x$, то

$$\overline{\Delta}(y^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \right| \overline{\Delta}(x_i^*), \quad \overline{\Delta}(y^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \left| \frac{\partial f(x)}{\partial x_i} \right| \overline{\Delta}(x_i^*).$$

$$\overline{\delta}(y^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \nu_i^* \overline{\delta}(x_i^*), \quad \overline{\delta}(y^*) \approx \sum_{i=1}^{n} \nu_i \overline{\delta}(x_i^*),$$

где $\nu_i^* = \dfrac{|x_i^*| \left| \dfrac{\partial f(x^*)}{\partial x_i} \right|}{|f(x^*)|}, \quad \nu_i = \dfrac{|x_i| \left| \dfrac{\partial f(x)}{\partial x_i} \right|}{|f(x)|}.$

ЛЕКЦИЯ 2.1

Устойчивость вычислительной задачи по входным данным

X – **множество допустимых входных данных.**

Y – **множество допустимых решений**

Корректность вычислительной задачи по Адамару. Вычислительная задача называется **корректной (по Адамару)**, если выполнены следующие 3-и условия.

• Решение вычислительной задачи $y \in Y$ существует при любых входных данных $x \in X$.

• Решение вычислительной задачи единственно.

Если хотя бы одно из условий не выполнено, то вычислительная задача называется **некорректной**.

Определение. Решение y вычислительной задачи называется **устойчивым по входным данным (абсолютно устойчивым)** x, если

$$\forall \varepsilon > 0, \quad \exists \delta(\varepsilon) > 0 : \quad \forall x^* (\Delta(x^*) < \delta(\varepsilon) \quad \Longrightarrow \quad \Delta(y^*) < \varepsilon).$$

Определение. Решение y вычислительной задачи называется **неустойчивым** x, если

$$\exists \varepsilon > 0, \quad \forall \delta > 0 : \quad \exists x^* (\Delta(x^*) < \delta(\varepsilon) \quad \Longrightarrow \quad \Delta(y^*) \geqslant \varepsilon).$$

Определение. Решение называется **относительно устойчивым**, если

$$\forall \varepsilon > 0, \quad \exists \delta(\varepsilon) > 0 : \quad \forall x^*(\delta(x^*) < \delta(\varepsilon) \quad \Longrightarrow \quad \delta(y^*) < \varepsilon).$$

Замечание. Одна и таже задача может оказаться как устойчивой, так и неустойчивой в зависимости от выбора способа вычисления абсолютных погрешностей $\Delta(x^*)$ и $\Delta(y^*)$.

Обусловленность вычислительной задачи. Абсолютное и относительное число обусловленности.

На практике: точность входных данных ограничена.

Вопрос: как повлияют малые, но конечные погрешности входных данных на решение?

Определение. Чувствительность решения вычислительной задачи к малым погрешностям входных данных – **обусловленность вычислительной задачи**.

Определение. Задача называется **хорошо обусловленной**, если малым погрешностям входных данных отвечают малые погрешности решения и **плохо обусловленной**, если происходят сильные изменения решения.

Определение. **Число обусловленности** (количественная мера степени обусловленности вычислительной задачи) – коэффициент возможного возрастания погрешностей в решении по отношению к вызвавшим их погрешностям входных данных.

Пусть:

$$\Delta(y^*) \leqslant \nu_\Delta \Delta(x^*), \qquad \delta(y^*) \leqslant \nu_\delta \delta(x^*).$$

Определение. величина ν_Δ – **абсолютное число обусловленности**, а ν_δ – **относительное число обусловленности**.

Замечание. В неравенства вместо Δ и δ могут быть и их границы $\overline{\Delta}$ и $\overline{\delta}$.

Для плохо обусловленнной задачи $\nu \gg 1$.

ЛЕКЦИЯ 2.2

Численное решение задач линейной алгебры

В линейной алгебре выделяют 4-ре основные задачи:

- решение систем линейных алгебраических уравнений;

- вычисление определителей;

- нахождение обратных матриц;

- нахождение собственных значений и собственных векторов.

Рассмотрим СЛАУ

$$Ax = f,$$

где A – матрица $m \times m$,
$x = (x_1, x_2, x_3, \ldots x_m)^T$ – искомый вектор,
$f = (f_1, f_2, f_3, \ldots f_m)^T$ – заданный вектор.

Некоторые сведения из линейной алгебры.

Определение. Функцию, заданную в линейном пространстве H, которая для $\forall x \in H$ ставит в соответствие число $||x||$, называют **нормой**, если она удовлетворяет следующим **аксиомам нормы**:

- $||x|| \geqslant 0, \quad \forall x \in H$ и $||x|| = 0 \quad \Longrightarrow \quad x = 0;$
- $||\alpha x|| = |\alpha|||x||$, где $\alpha \in \mathbb{R}$
- $||x + y|| \leqslant ||x|| + ||y||.$

Наиболее часто применяемые нормы:

$$||x||_p = \left(\sum_{i=1}^{m} |x_i|^p \right)^{1/p}, \quad ||x||_\infty = \max_{1 \leqslant i \leqslant m} |x_i|,$$

где частными случаями нормы $||x||_p$ являются нормы:

$$||x||_1 = \sum_{i=1}^{m} |x_i| \ - \ \text{октаэдрическая норма;}$$

$$||x||_2 = \left(\sum_{i=1}^{m} |x_i|^2 \right)^{1/2} \quad - \ \text{евклидова}$$

или сферическая) норма.

В качестве меры степени близости векторов $||x||$ и $||x^*||$ введем **абсолютную и относительную погрешности** вектора $||x^*||$

$$\Delta\left(x^*\right) = ||x - x^*||, \quad \delta\left(x^*\right) = \frac{||x - x^*||}{||x||}.$$

Пусть $\left\{x^{(n)}\right\}_{n=1}^{\infty}$ - последовательность векторов $x^{(n)} = \left(x_1^{(n)}, x_2^{(n)}, \ldots, x_m^{(n)}\right)$.

Говорят, что последовательность векторов $x^{(n)}$ **сходится в вектору** x при $n \to \infty$, если

$$\Delta\left(x^{(n)}\right) = \left\|x^{(n)} - x\right\| \to 0, \quad \text{при} \quad n \to \infty$$

Методы численного решения задач линейной алгебры

• **Прямые методы**. Решение системы x находится за конечное число арифметических операций.

• **Итерационные методы (методы последовательных приближений)**. Решение x СЛАУ находится как предел последовательных приближений $x^{(n)}$ при $n \to \infty$.

Норма матрицы

Определение. Пусть в линейном арифметическом пространстве $\mathbb{R}^m$ задана норма $||\cdot||_*$. Норму $||\cdot||_k$ в линейном пространстве $M_m(\mathbb{R})$ называют **согласованной** с нормой $||\cdot||_*$, если для $\forall A \in M_m(\mathbb{R})$ и $\forall x \in \mathbb{R}^m$ выполняется соотношение:

$$||Ax||_* \leqslant ||A||_k ||x||_*.$$

Определение. Число $||A|| = \sup\limits_{x\neq 0} \dfrac{||Ax||}{||x||}$ называется **нормой** матрицы A **подчиненной** данной норме $||x||$.

Для подчиненной нормы матрицы A выполняются все аксиомы нормы:

- $||A|| \geqslant 0$ и $||A|| = 0 \quad \Longrightarrow \quad A = 0;$

- $||\alpha A|| = |\alpha| ||A||;$

- $||A + B|| \leqslant ||A|| + ||B||$ для $\forall A, B;$

Дополнительно

- $||AB|| \leqslant ||A|| ||B||$ для $\forall A, B;$

- $||Ax|| \leqslant ||A|| ||x||.$

Примеры подчиненных норм матриц

Норма $||A||_1 = \max\limits_{1\leqslant j\leqslant m} \sum\limits_{i=1}^{m} |a_{ij}|$ – **максимальная столбцевая** или **октаэдрическая норма**, подчинена норме $||x||_1$.

Норма $||A||_\infty = \max\limits_{1\leqslant i\leqslant m} \sum\limits_{j=1}^{m} |a_{ij}|$ – **максимальная строчная** или **кубическая норма** подчинена норме $||x||_\infty$.

Обусловленность СЛАУ.

Рассмотрим СЛАУ

$$Ax = f, \quad A \in M_m(\mathbb{R}).$$

Рассмотрим два типа устойчивости:

• **устойчивость по правой части**, когда возмущается только правая часть f, а матрица A остается неизменной,

• **коэффициентная устойчивость**, когда возмущается только матрица A, а правая часть f остается неизменной.

Вместо вектора f задается близкий ему вектор $\tilde{f}$ (например, из-за погрешностей округления). Рассмотрим «возмущенную систему»

$$A\tilde{x} = \tilde{f}, \quad \text{где} \quad \Delta x = \tilde{x} - x, \qquad \Delta f = \tilde{f} - f.$$

Определение. Говорят, что система $Ax = f$ **устойчива по правой части**, если при $\forall f, \tilde{f}$ справедлива оценка

$$||\Delta x|| \leqslant M_1 ||\Delta f||,$$

где $M_1 > 0$ – постоянная, не зависящая от правых частей $f, \tilde{f}$.

Пусть $\det A \neq 0$. Покажем, что система устойчива по правой части.

$$A(\Delta x) = \Delta f \quad \Rightarrow \quad \Delta x = A^{-1}(\Delta f).$$

Используя аксиомы нормы, получаем

$$||\Delta x|| \leqslant ||A^{-1}||\,||\Delta f||.$$

Следовательно $M_1 = ||A^{-1}||$.

Замечание. Чем ближе к нулю определитель матрицы A, тем больше постоянная M_1, тем сильнее погрешность правой части может исказить искомое решение.

Рассмотрим относительные погрещности δx и δf.

Используя аксиомы нормы получаем

$$||f|| \leqslant ||A||\,||x||.$$

Тогда

$$\frac{||\Delta x||}{||x||} \leqslant \mathrm{cond(A)} \frac{||\Delta f||}{||f||},$$

где $\mathrm{cond(A)} = ||A^{-1}||\,||A||$.

Определение. Число $\mathrm{cond}(\mathrm{A})$, входящее в оценку, называется **числом обусловленности** матрицы A и характеризует степень зависимости относительной погрешности решения от относительной погрешности правой части.
Матрицы с большим числом обусловленности называют **плохо обусловленными матрицами**.

Замечание. Число обусловленности матрицы всегда положительно и зависит от заданной нормы матрицы.

Свойства числа обусловленности матрицы.

- $\mathrm{cond}(\mathrm{A}) = \mathrm{cond}(\mathrm{A}^{-1})$.
- $\mathrm{cond}(\mathrm{AB}) \leqslant \mathrm{cond}(\mathrm{A})\mathrm{cond}(\mathrm{B})$.
- $\mathrm{cond}(\mathrm{A}) \geqslant 1$.
- $\mathrm{cond}(\mathrm{A}) \geqslant \dfrac{|\lambda_{\max}|}{|\lambda_{\min}|}$,

где $\lambda_{\max}$, $\lambda_{\min}$ – наибольшее и наименьшее по абсолютной величине собственные значения.