Пловдивски университет „Паисий Хилендарски”
Факултет по математика и информатика
Катедра “Приложна математика и моделиране”

“Компютърни числени методи”
ЛЕКЦИЯ 1

Проф. д-р Снежана Гочева-Илиева, snow@uni-plovdiv.bg

Он-лайн обучение: www.fmi-plovdiv.org/evlm
www.fmi-plovdiv.org/evlm/DBbg - числени методи

Литература:

1. Бояджиев Д., Гочева С., Макрелов И., Попова Л. – Ръководство по числени методи – част 1, Издания: 2003, 2006, 2010.
2. Семерджиев Х., Боянов Б., Числени методи, ПУ.
3. Гочева-Илиева С., Въведение в система Mathematica, ЕксПрес, Габрово, 2009.

Съдържание:

Основни понятия в компютърните числени методи

1. Основни характеристики на компютърното смятане 3
   1.1 Пример 1. Някои задачи изискват стотици и милиони години компютърни изчисления 4
   1.2 Пример 2. Взрив на грешката от закръгляне 8
2. Числени методи и математическо моделиране 9
3. Видове грешки 13
   3.1 Приближаване на числа, абсолютна и относителна грешка 14
   3.2 Грешки от изчисления 21
   3.3 Неустойчивост на грешката 24
   3.4 Правила при действия с приближени числа 27
   3.5 Грешки от числения метод 29

1. Основни характеристики на компютърното смятане

- Повишена скорост – около 10 млн. аритметични операции в секунда за среден клас персонален компютър
- Практически неограничена степен на точност
- Улеснен обмен на данните между различни програмни сегменти, програми, компютри и компютърни мрежи
- Високоефективни паралелни изчисления
- Символни изчисления
- Качествена машинна графика за представяне на резултатите
- Използуване на супермощни специализирани интерактивни софтуерни системи за научни пресмятания като *Mathematica*, *MatLab*, *Maple*, *Reduce* и др.
- Он-лайн изчисления на сайта: **http://www.wolframalpha.com/**

1.1 Пример 1. - Някои задачи изискват стотици и милиони години компютърни изчисления ...

<u>Правило:</u> Дори и с най-бърз компютър не трябва наивно да прилагаме математическите рецепти и дефиниции.

Преговор - Пресмятане на детерминанти.

А) Детерминанта от 2-ри ред (n=2):

$$A_2 = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 2 \end{vmatrix} = 2.2 - 3.1 = 4 - 3 = 1$$

Б) Детерминанта от 3-ти ред (n=3):

$$A_3 = \begin{vmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \\ 2 & 0 & 5 \end{vmatrix} = 2.4.5 + 1.1.2 + 0.0.3 - 2.4.0 - 2.0.1 - 3.1.5$$

$$= 40 + 2 + 0 - 0 - 0 - 15 = 27$$

Пример 1-1. Като се приложи директно дефиницията, да се пресметне стойността на детерминанта от n -ти ред при $n=20$.

Решение:

$$A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & & & \\ a_{n1} & a_{n1} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} = \sum (-1)^{[\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_n]} a_{1\alpha_1} a_{2\alpha_2} \ldots a_{1\alpha_n} \quad , \qquad (0.1)$$

равно на сумата от $n!$ произведения, където сумирането се отнася до всичките $n!$ на брой пермутации $\alpha_1 \alpha_2 \ldots \alpha_n$ от вторите индекси.

Във всяко събираемо има n-1 произведения, събираемите са $n!$, т.е. общият брой аритметични действия е приблизително

$Брой = n.\,n!$

При $n = 20$ - $Брой = 20.20! = 20.20.19.18...1 \approx 4{,}8.10^{19}$.

В 1 година има средно $Сек\_\,година = 365.\ 24.\ 60.\ 60 = 3{,}1.10^7$ секунди и за всяка секунда се извършват $Опер\_секунда = 1.10^7$.

$$\boxed{\frac{Брой}{Сек\_година.\,Опер\_секунда} = \frac{4{,}8.10^{19}}{3{,}1.10^7.10^7} \approx 1{,}5.10^5 = 150\,000}$$ години!

За щастие съществуват много по-икономични числени методи, които за същата задача изискват едва около n^3 операции, т.е. при $n = 20$ приблизително $20.20.20 = 8000$ и резултатът ще се появи на същия компютър за ... една хилядна част от секундата!

1.2 Пример 2. Взрив на грешката от закръгляне

Да се пресметне сумата: $\sin(x) = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \ldots + (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!} + \ldots$

Смятаме докато пореден член < $\varepsilon = 10^{-8}$, напр. за $x = \frac{\pi}{6} + 2k\pi$

k	x	**Sin(x) -** приближено решение
0	$\pi/6$	0,5000000
1	$\pi/6+2\pi$	0,5000052
2	$\pi/6+4\pi$	0,5000144
3	$\pi/6+6\pi$	0,6488953
4	$\pi/6+8\pi$	-448,0291
5	$\pi/6+10\pi$	66527,500
...	...	...

Взрив на грешката!

Точното решение за всяко k. $30^0 = 0,5$

ОСНОВНИ ПОНЯТИЯ

2. Числени методи и математическо моделиране

За решаване на математически задачи съществуват три основни групи методи: графични, аналитични и числени. И трите метода могат да се реализират на компютър, като за целта се използва специализиран научен софтуер: Mathematica, Maple, Matlab и др., или който и да е от стандартните езици за програмиране: C++, Pascal и др.

Графичните методи могат да помогнат за визуално определяне на редица характеристики на решението.

Аналитичните методи са тези, чрез които решението може да се получи точно, във вид на формула.

Числените методи получават резултата приближено във вид на числа.

Определение. **Числените методи** свеждат даден клас математически задачи до ефективни алгоритми, с помощта на които те могат да се решат с краен брой аритметични действия и за краен интервал от време, а грешката на резултата може да се оцени предварително. Те са изцяло ориентирани към пресмятания с компютър.

За да се реши дадена реална задача с някой от изброените методи, тя трябва предварително да бъде зададена в подходящ вид, наречен математически модел.

Определение. **Математическият модел** е приближено описание на даден клас реални явления с помощта на математическа символика.

Например: Изчисляването на обема на бензин в цистерна се свежда до тримерен интеграл, движението на спътник - до система диференциални уравнения с променливи коефициенти и т.н.

Изключително важно за всеки модел е той да бъде адекватен, т.е. достатъчно точно да отразява същността на моделираното явление или процес. Адекватността на модела се установява чрез проверката му в практиката, а най-добрият критерий за адекватност е, когато моделът може да “предсказва” достатъчно точно бъдещите състояния на процеса или явлението.

Когато моделът не дава достатъчно удовлетворително решение на поставената задача неговите параметри могат многократно да се коригират, а самият модел може да се променя. Тази последователност от промени в модела се нарича математическо моделиране.

Определение. **Математическото моделиране** е цикличен процес на създаване и уточняване на математически модели. Целта на този процес е получаването на достатъчно удовлетворителни резултати, в рамките на зададена допустима грешка.

Математическото моделиране преминава през следните основни етапи:

1. **Постановка на задачата.**
2. **Построяване на математически модел.**
3. **Избор или разработване на числен метод.**
4. **Съставяне на алгоритъм.**
5. **Програмиране.**
6. **Получаване на резултати от модела.**
7. **Цикъл на моделирането до достигане на удовлетворителни резултати.**
8. **Внедряване.**

3. Видове грешки

Основен въпрос при численото решаване на задачи е анализ на възможните грешки.

Различават се следните видове грешки:

- неотстранима грешка (грешка от експериментални данни)
- грешка от изчисления (от закръгляне и от аритметични действия)
- грешка от численият метод

Сумата от тези три грешки формира т.н. пълна грешка, която характеризира крайния резултат.

3.1 Приближаване на числа, абсолютна и относителна грешка

Нека x е дадено точно число, а $\tilde{x}$ е негово приближено.

Определение 1. Реалното число $\alpha(\tilde{x})$ се нарича абсолютна грешка на приближението $\tilde{x}$ на x, ако е горна граница на модула на тяхната разлика, т.е. $\alpha(\tilde{x}) \geq |x - \tilde{x}|$. (1)

Последното се записва и като равенство $\alpha(\tilde{x}) = |x - \tilde{x}|$.

Ще отбележим, че абсолютната грешка зависи от мерната единица, например килограм, метър, унция и т.н. Ако разрешим неравенството (1) спрямо x ще получим: $\tilde{x} - \alpha(\tilde{x}) \leq x \leq \tilde{x} + \alpha(\tilde{x})$, което определя интервала $[\tilde{x} - \alpha(\tilde{x}); \tilde{x} + \alpha(\tilde{x})]$, в който се намира точното число.

Определение 2. Реалното число $\Delta(\tilde{x})$ се нарича <u>относителна грешка</u> на приближението $\tilde{x}$ на x, ако удовлетворява условието

$$\Delta(\tilde{x}) \geq \frac{\alpha(\tilde{x})}{|\tilde{x}|}, \qquad \tilde{x} \neq 0. \tag{2}$$

Записва се и като:

$$\Delta(\tilde{x}) = \frac{\alpha(\tilde{x})}{|\tilde{x}|}$$

Относителната грешка е безмерна величина и се изразява с проценти.

Пример 1. Да се намерят относителните и абсолютните грешки на числото $x = \frac{2}{7}$ и две негови приближения $\tilde{x}_1 = 0,286$ и $\tilde{x}_2 = 0,2857$.

Решение. Имаме $x = \frac{2}{7} = 0,285714285...$.

За абсолютните грешки намираме:

$$\left| x - \tilde{x}_1 \right| = \left| -0,00028571... \right| \le \alpha(\tilde{x}_1),$$

$$\left| x - \tilde{x}_2 \right| = \left| 0,00001428... \right| \le \alpha(\tilde{x}_2).$$

Можем да изберем например: или $\alpha(\tilde{x}_1) = 0,0003$.

Съответно за $\tilde{x}_2$: $\alpha(\tilde{x}_2) = 0,00002$, $\alpha(\tilde{x}_2) = 0,00005$ или $\alpha(\tilde{x}_2) = 0,0001$.

За относителните грешки намираме:

$$\Delta(\tilde{x}_1) = \frac{\alpha(\tilde{x}_1)}{\left|\tilde{x}_1\right|} = \frac{0,0003}{0,286} = 0,001048...$$,

$\Delta(\tilde{x}_1) = 0,002$, т.е. $\Delta(\tilde{x}_1) = 0,2\%$.

$$\Delta(\tilde{x}_2) = \frac{\alpha(\tilde{x}_2)}{\left|\tilde{x}_2\right|} = \frac{0,00005}{0,2857} = 0,000175...$$,

$\Delta(\tilde{x}_2) = 0,0002$ или $\Delta(\tilde{x}_2) = 0,02\%$.

Пример 2. Да се определи абсолютната и относителната грешка на числото $b = 81,002$.

Решение. В случая не знаем дали b е точно число или приближено. Затова формално считаме, че последната цифра се явява резултат от правилата на закръгляне до третия знак, т.е. абсолютната грешка е $\alpha(b) = 0,0005$.

Интервалът, в който се намира числото е:
(81,0015; 81,0025).

Относителната му грешка е:

$$\Delta(b) = \frac{\alpha(b)}{|b|} = \frac{0,0005}{81,002} = 0,000006172...,$$

т.е. $\Delta(b) = 0,0007\%$.

Пример 3. Дадено е приближеното число $\tilde{z} = 0,00123$. Да се определят абсолютната и относителната му грешка.

Решение. За абсолютната грешка имаме: $\alpha(\tilde{z}) = 0,000005$,

а за относителната $\Delta(\tilde{z}) = \dfrac{\alpha(\tilde{z})}{|\tilde{z}|} = \dfrac{0,000005}{0,00123} = 0,004065...$, т.е.

$\Delta(\tilde{z}) = 0,41\%$.

Забележка. Обърнете особено внимание на последния резултат! Той показва, че относителните грешки на числа, близки до нулата, са големи! Следователно, следва да се избягва деление на малки числа.

Задача. Да се определи кое претегляне е по-точно: (а) на жп вагон с тегло 45 т и грешка $\alpha_1 = 50$ кг, или (б) на лекарство с тегло 0,5 грама и грешка $\alpha_2 = 0,001$ грама.

3.2 Грешки от изчисления

Нека x и y са точни, а $\tilde{x}$ и $\tilde{y}$ са съответни на тях приближени числа. Означаваме $z = x + y$ и $\tilde{z} = \tilde{x} + \tilde{y}$. За абсолютната грешка на сумата намираме:

$$\alpha(\tilde{z}) = |z - \tilde{z}| = |x + y - \tilde{x} - \tilde{y}| \le |x - \tilde{x}| + |y - \tilde{y}| \le \alpha(\tilde{x}) + \alpha(\tilde{y}),$$

или

$$\alpha(\tilde{x} + \tilde{y}) \le \alpha(\tilde{x}) + \alpha(\tilde{y}).$$

Това показва, че при събиране абсолютната грешка на сумата е равна на сумата от абсолютните грешки на събираемите.

Аналогично се доказват подобни оценки за всички аритметични действия. Валидна е следната по-обща

Теорема. Нека $u = f(x)$ е произволна диференцируема функция на x, където $f(x)$ се разглежда като последователност от аритметични действия над x. Ако $\tilde{x}$ е приближение на x, и $\tilde{u} = f(\tilde{x})$ е съответното приближение към u. Тогава абсолютната грешка на резултата е непрекъсната функция на грешката $\tilde{x}$.

Доказателство. Нека предположим, че f е диференцируема функция в околност на x. Тогава по теоремата за средните стойности:

$$\alpha(\tilde{u}) = |u - \tilde{u}| = |f(x) - f(\tilde{x})| = |f'(\xi)(x - \tilde{x})| \leq |f'(\xi)||x - \tilde{x}| \leq |f'(\xi)|\alpha(\tilde{x})$$

При ограничена първа производна получаваме:

$$\alpha(\tilde{u}) \leq M\alpha(\tilde{x}), \quad M = const,$$

с което теоремата е доказана.

От тази теорема в частност следва, че с точност до константа за основните аритметични действия, са изпълнени оценките:

$$\alpha(\tilde{x}-\tilde{y})=\alpha(\tilde{x})+\alpha(\tilde{y}),\quad \alpha(\tilde{x}.\tilde{y})=\alpha(\tilde{x})+\alpha(\tilde{y}),\quad \alpha(\tilde{x}/\tilde{y})=\alpha(\tilde{x})+\alpha(\tilde{y}),\quad \tilde{y}\neq 0.$$

Реално, при извършване на огромен брой изчисления поради различните знаци на приближенията (с недостиг или с излишък) абсолютните грешки се компенсират и сумарната грешка е малка. Не са рядко изключение обаче и случаите, при които грешките само се натрупват и могат да доведат до резултати, клонящи към безкрайност. Този феномен се нарича “взрив на грешката” или изчислителна неустойчивост. Той може да се прояви независимо от точността (броят на знаците след десетичната запетая) на участващите числа.

3.3 Неустойчивост на грешката

Определение 3. Неустойчивост на грешката от изчисления (абсолютна или относителна) се нарича случаят, когато "малки" грешки във входните данни видят до "големи" грешки в резултата.

В увода бе приведен пример за взрив на грешката при сумиране на функцията $\sin(x)$. Ще приведем още един характерен пример, свързан с неустойчивостта на изчисленията.

Пример 4. Неустойчивост на относителната грешка при изваждане на близки числа.

Нека разгледаме близките числа $x = 2,123$ и $y = 1,985$.

Разликата им е $z = x - y = 0,138$.

Имаме $\alpha(x) = \alpha(y) = 0,0005$, $\alpha(z) = \alpha(x) + \alpha(y) = 0,001$,

$$\Delta(x) = \frac{\alpha(x)}{|x|} = \frac{0,0005}{2.123} = 0,0002355..., \ \Delta(x) = 0,025\%,$$

$$\Delta(y) = \frac{\alpha(y)}{|y|} = \frac{0,0005}{1.985} = 0,0002518..., \ \Delta(y) = 0,026\%,$$

$$\Delta(z) = \frac{\alpha(z)}{|z|} = \frac{0,001}{0,138} = 0,00724..., \ \Delta(z) = 0,73\%.$$

За отношението на относителните грешки получаваме $0,73/0,025 \approx 29$, т.е. относителната грешка е на разликата е 29 пъти по-голяма спрямо относителната грешка на x и y.

Забележка. Един подход за избягване изваждането на близки числа е тяхното "раздалечаване" чрез рационализиране.

Например: $\sqrt{101} - 10 = \dfrac{(\sqrt{101} - 10).(\sqrt{101} + 10)}{\sqrt{101} + 10} = \dfrac{1}{\sqrt{101} + 10}$.

3.4 Правила при действия с приближени числа

Редът на грешката зависи както от точността на началните данни, така и от този на междинните резултати.

- Намира се приближеното число от началните данни с най-голяма грешка, която определя и грешката на резултата. Нека тя е например в k -тия знак след десетичната запетая.
- Останалите начални данни могат да се закръглят с 1-2 знака повече от k.
- Всички междинни резултати се извършват с 1-2 знака след k.
- Избягва се по възможност изваждане на близки числа и деление на числа, близки до 0.

- Резултатът закръгляме до k -ти знак след десетичната запетая, ако няма и друг тип грешка – например от числения метод.

Забележка. Много да се внимава с математически, физични и други константи, които следва да се задават с възможно по-голяма точност. Например заместването $\pi = 3,14$ реално може да влоши точността на резултата до два знака след десетичната запетая, дори ако се работи с двойна точност над другите данни.

3.5 Грешки от числения метод

Всяка решавана задача може да се запише формално в явен вид:

$$y = A(x)\,, \quad x \in R_1\,, \quad y \in R_2\,, \tag{3}$$

или в неявен вид:

$$A(x, y) = 0\,, \quad A : R_1 \to R_2 \tag{4}$$

където се търси y по дадено x, или x по дадено y (обратна задача). Тук са използвани означенията $R_{1,2}$ за съответните пространства, към които принадлежат x и y, а A е оператор (последователност от действия), преобразуващ x в y.

За да оценяваме "близостта" на елементите, ще считаме, че съответните пространства са нормирани и ще означаваме нормите им съответно с $\|\cdot\|_{R_1}$, $\|\cdot\|_{R_2}$.

При прилагането на даден числен метод, той от своя страна работи обикновено в подпространства на дадените, например $\overline{R_1} \subset R_1$, $\overline{R_2} \subset R_2$, а операторът A се заменя с приближен $\tilde{A}$. Така получаваме задачата:

$$\tilde{y} = \tilde{A}(\tilde{x}), \tag{5}$$

където $\tilde{x}$ е някакво приближение до началните данни (получено чрез измерване, при закръгляне и т.н.), а $\tilde{y}$ е приближение, получено от избрания ЧМ.

Решаването на конкретна задача от класа (5) със зададени значения на x ще доведе до допускане на изчислителни грешки,т.е. до приближена задача от вида:

$$\tilde{\tilde{y}} = \tilde{\tilde{A}}(\tilde{\tilde{x}}).$$

За разликата от точното и приближеното решение имаме:

$$y - \tilde{\tilde{y}} = (y - \tilde{y}) + (\tilde{y} - \tilde{\tilde{y}})$$

и използувайки свойствата на нормите, получаваме оценката:

$$\| y - \tilde{\tilde{y}} \|_{\overline{R_2}} \leq \| y - \tilde{y} \|_{\overline{R_2}} + \| \tilde{y} - \tilde{\tilde{y}} \|_{\overline{R_2}}. \qquad (6)$$

Това показва, че пълната грешка на резултата не надминава сумата от грешката на избрания числен метод и изчислителната грешка. Стои проблемът за оценяване на тези две грешки.

Един пример за задача от вида (3-4) е изчисляването на определен риманов интеграл от реална функция $I = \int_a^b f(t)dt$. Тук начални данни са a, b и функцията $f(t)$, операторът A е действието интегриране, а търсеният резултат е числото I. Пространствата са съответно: $R_1 = C_{[a,b]}$, $R_2 = R$.

При използването на числен метод за пресмятане на интеграла, например, чрез някоя квадратурна формула, се работи в пространствата $\overline{R_1} = R$ и $\overline{R_2} = R$, а операторът $\overline{A}$ е крайна сума, зависеща от параметър, например стъпка h. Приближеното значението на интеграла се получава с някаква грешка, пропорционална на степен на стъпката.

Определение. Казваме, че $\psi = O(\varphi)$, ако съществува константа $M \geq 0$, такава, че за функциите $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ е вярно неравенството $|\psi(x)| \leq M|\varphi(x)|$ в определена област. Символът O се нарича символ на Ландау и се чете "о-голямо".

Чрез този символ например точността на даден метод може да се представи във вида $O(h^s)$, където h е малък параметър.

Друг изключително важен проблем, освен оценка на грешката в (6), касае поведението на решението на изходната задача (3-4), както и това на числения метод.

Определение 4. Решението на задача (3) е устойчиво по начални данни, когато е вярно неравенството:

$$\| y - \tilde{y} \|_{\overline{R_2}} \leq C \| x - \tilde{x} \|_{\overline{R_1}} . \qquad (7)$$

Това неравенство означава, че решението y зависи непрекъснато от x, т.е. малки грешки в изходните данни водят до малки грешки в резултата.

При типично неустойчива задача, незначителни промени в данните (след закръгляне) водят до големи грешки, а понякога и до съвсем неверни решения.

Определение 5. Ще казваме, че задачата (3) е **<u>коректна</u>**, когато са изпълнени следните условия:

1^0) съществува решение y,

2^0) решението е единствено в подобласт на R_2,

3^0) решението е устойчиво по начални данни.

Освен неустойчивост по начални данни има и други типове неустойчивост, например неустойчивост относно коефициентите на задачата, относно дясната част и пр.

В други случаи, макар и изходната задача да е коректно поставена, може да се окаже неустойчив избрания числен метод. Аналогично на горното определение един ЧМ ще наричаме коректен, когато съществува единствено и устойчиво по начални данни решение на задача (5) в някаква подобласт на $\overline{R_1}$. Има много случаи на неустойчиви, т.е. некоректни ЧМ, например численото диференциране, решаване на диференциални задачи и други.

Определение 6. Ще казваме, че един числен метод, зависещ от параметър h е сходящ, когато полученото по метода приближено решение $\tilde{y}_h$ е сходящо по норма към точното решение $\tilde{y}_h$ на задача (3), т.е.

$$\left\| y - \tilde{y}_h \right\| \underset{h \to 0}{\to} 0 .$$

Следователно основните изисквания за правилно прилагане на даден числен метод са: <u>изходната задача да е коректна, а численият метод да е устойчив и сходящ</u>.