Лобанов Алексей Иванович

Основы вычислительной математики

Лекция 1

8 сентября 2009 года

Становление – конец XIX века

Карл Рунге

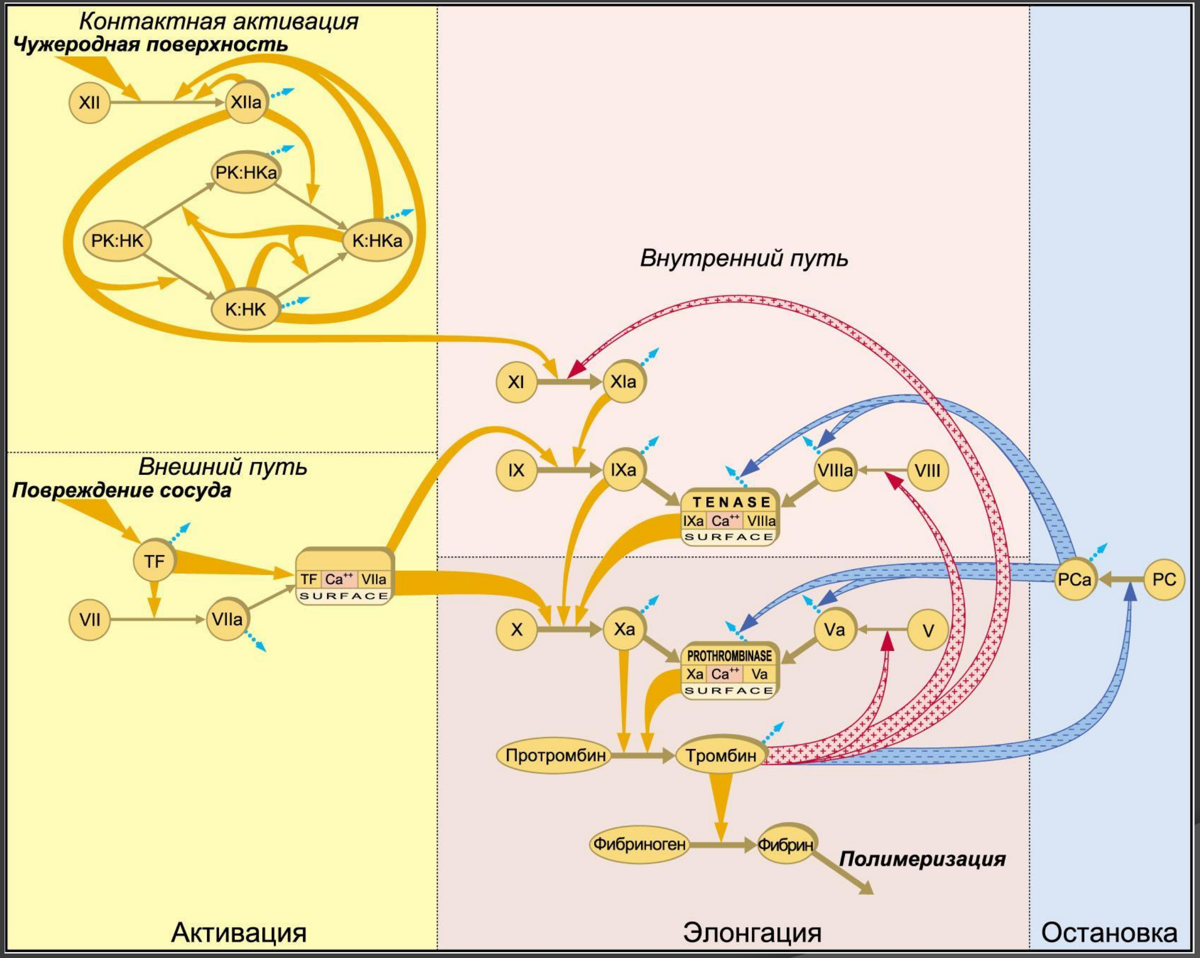
Алексей Николаевич Крылов

Основные задачи

Физические модели – дифференциальные уравнения

Приближенное решение нелинейных дифференциальных уравнений или систем

Пример простой математической модели
Общая схема функционирования ССК (М.А.Пантелеев, Ф.И.Атауллаханов)



Пример простой математической модели

- Система в частных производных без учета конвективных потоков

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = D_1 \Delta\theta + \frac{\alpha\theta^2}{\theta + \theta_0} - \kappa_1\theta - \gamma\theta\varphi$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = D_2 \Delta\varphi + \beta\theta \cdot \left(1 - \frac{\varphi}{C}\right)\left(1 + \left(\frac{\varphi}{\varphi_0}\right)^2\right) - \kappa_2\varphi$$

Проблемы

Непрерывная задача – дискретная задача

Качество приближения

АППРОКСИМАЦИЯ

Проблемы

- Действительное число (бесконечная десятичная дробь) – операции с конечной длиной мантиссы
- Ошибки округления
- УСТОЙЧИВОСТЬ

Проблемы

Корректность постановки – непрерывная зависимость от начальных данных

ОБУСЛОВЛЕННОСТЬ

$$\begin{cases} u + 10v = 11 \\ 100u + 1001v = 1101 \end{cases}$$

$$\begin{cases} u + 10v = 11,01 \\ 100u + 1001v = 1101 \end{cases}$$

Погрешности

Пусть u и u^* — точное и приближенное значение некоторой величины соответственно. Тогда *абсолютной погрешностью* приближения u^* называется величина Δ, удовлетворяющая неравенству

$$|u - u^*| \le \Delta.$$

Погрешности

Относительной погрешностью называется величина $\delta(u^*)$,

удовлетворяющая неравенству

$$\left|\frac{u - u^*}{u^*}\right| \le \delta(u^*).$$

Обычно используется запись

$$u = u^*(1 \pm \delta(u^*)).$$

Погрешности

Машинный эпсилон

машинным ε называют наибольшее из чисел, для которых в рамках используемой системы вычислений выполнено $1 + \varepsilon = 1$

1. Задача численного дифференцирования

Пусть задана таблица значений *xi*. В дальнейшем совокупность точек на отрезке, котором проводятся вычисления, иногда будут называться *сеткой*, каждое значение *xi* — *узлом* сетки. Пусть сетка равномерная, и расстояние между узлами равно — *шагу сетки*. Пусть узлы сетки пронумерованы в порядке возрастания

$$x_j = a + jh, \qquad j = 0, \dots, N.$$

1. Задача численного дифференцирования

Производная

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

Конечная разность

$$f'(x_j) \approx \frac{f(x_j + h) - f(x_j)}{h}. \qquad (1)$$

1. Задача численного дифференцирования

- Погрешность формулы (1)

Пусть *f – проекция на сетку дважды* непрерывно дифференцированной функции, тогда

$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h}=\frac{1}{h}\left[\left[f(x)+hf'(x)+\frac{h^2}{2}f''(\xi)\right]-f(\quad)\right]$$

$$=f'(x)+O(h),$$

1. Задача численного дифференцирования

Полная погрешность

$$\Delta \le \frac{h}{2}\max_{\xi\in[x,x+h]}\left|f''(\xi)\right| + \frac{2\varepsilon\max\limits_{\eta\in[x,x+h]}\left|f(\eta)\right|}{h} = O(h) + O(h^{-1}),$$

1. Задача численного дифференцирования

Оптимальный шаг дифференцирования

$$k = \max\left|f(x)\right|, \qquad M_2 = \max\left|f''(x)\right|.$$

$$err = \frac{2k\varepsilon}{h} + \frac{M_2 h}{2}, \qquad \frac{derr}{dh} = 0,$$

$$\frac{M_2}{2} - \frac{2k\varepsilon}{h^2} = 0, \qquad h_{\mathrm{opt}} = 2\sqrt{\frac{k\varepsilon}{M_2}}.$$

1. Задача численного дифференцирования

Формула второго порядка

$$f'(x) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x}.$$

$$f'(x_j) \approx \frac{f(x_j + h) - f(x_j - h)}{2h}. \qquad (2)$$

1. Задача численного дифференцирования

Оптимальный шаг для формулы второго порядка (2)

$$M_3 = \max_{x\in[a,b]} \left| f'''(x) \right|, \qquad err = \frac{M_3 h^2}{3} + \frac{k\varepsilon}{h},$$

$$\frac{derr}{dh} = 0, \qquad \frac{2M_3 h}{6} - \frac{k\varepsilon}{h^2} = 0,$$

$$h_{\text{opt}} = \sqrt[3]{\frac{3k\varepsilon}{M_3}}.$$

1. Задача численного дифференцирования

Вычисление второй производной

$$f'(x_j) \approx \frac{f(x_j + h) - 2f(x_j) + f(x_j - h)}{h^2}.$$

1. Задача численного дифференцирования

Метод неопределенных коэффициентов

Введем на рассматриваемом отрезке шаблон из нескольких точек

$$f'(x_j) \approx \frac{1}{h} \sum_{k=-l}^{m} \alpha_k f(x_j + kh),$$

1. Задача численного дифференцирования

Раскладываем в ряд Тейлора в окрестности *x*

$$\frac{1}{h}\sum_{k=-l}^{m}\alpha_k f(x_j+kh)=\frac{1}{h}f(x_j)\sum\alpha_k+f'(x_j)\sum k\alpha_k+f''(x_j)h\sum\frac{k^2}{2}\alpha_k+$$

$$+f'''(x_j)h^2\sum\frac{k^3}{6}\alpha_k+\ldots+f^{(n)}(x_j)h^{n-1}\sum\alpha_k\frac{k^n}{n!}+\ldots$$

1. Задача численного дифференцирования

Система линейных уравнений метода неопределенных коэффициентов

$$\sum \alpha_k = 0, \qquad \sum k\alpha_k = 1,$$

$$\sum \alpha_k \frac{k^2}{2} = 0, \qquad \ldots \qquad \sum \alpha_k \frac{k^n}{n!} = 0,$$

1. Задача численного дифференцирования

Система

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \ldots & 1 \\ -l & -l+1 & \ldots & m \\ l^2 & (l-1)^2 & \ldots & m^2 \\ (-l)^3 & (-l+1)^3 & \ldots & m^3 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \ldots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \ldots \end{pmatrix}$$

1. Задача численного дифференцирования

- Определитель данной матрицы — детерминант Вандермонда. Из курса линейной алгебры известно, что он не равен нулю. Тогда существует единственный набор коэффициентов α, который позволяет найти на шаблоне из (1 + l + m) точек значение первой производной с точностью $O(h^{l+m})$.

1. Задача численного дифференцирования

Для нахождения второй производной можно использовать ту же самую формулу с небольшой модификацией

$$f'(x_j) \approx \frac{1}{h^2} \sum_{k=-l}^{m} \tilde{\alpha}_k f(x_j + kh),$$

1. Задача численного дифференцирования

Система уравнений

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ -l & -l+1 & \dots & m \\ l^2 & (l-1)^2 & \dots & m^2 \\ (-l)^3 & (-l+1)^3 & \dots & m^3 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \alpha_3 \\ \alpha_4 \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}$$

1. Задача численного дифференцирования

доказано следующее утверждение. На сеточном шаблоне, включающем в себя N + 1 точку, с помощью метода неопределенных коэффициентов всегда можно построить единственную формулу для вычисления производной порядка p (от 1 до N включительно) с точностью не хуже, чем $O(h^{N+1-p})$

.