

Лобанов Алексей Иванович

Основы вычислительной математики

Лекция 1

8 сентября 2009 года

Становление – конец XIX века



Карл Рунге



Алексей Николаевич Крылов

Основные задачи

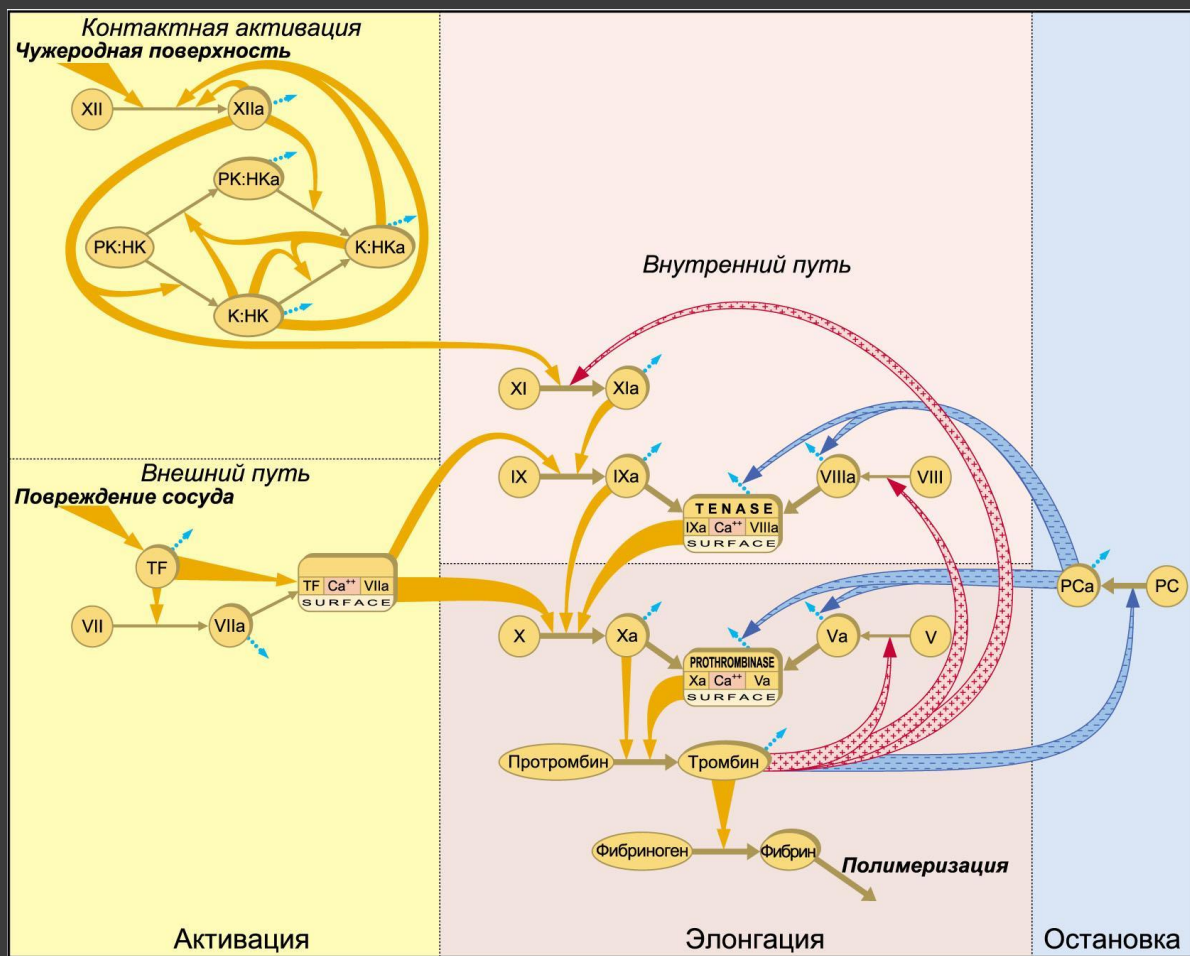
Физические модели –
дифференциальные уравнения

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

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

Погрешности

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

удовлетворяющая неравенству

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

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 $1 + \varepsilon \neq 1$

1. Задача численного дифференцирования

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

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

1. Задача численного дифференцирования

Производная

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

Конечная разность

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

1. Задача численного дифференцирования

- Погрешность формулы (1)

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

$$\begin{aligned} \frac{f(x+h) - f(x)}{h} &= \frac{1}{h} \left[\left[\tilde{f}(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\xi) \right] - f(x) \right] \\ &= f'(x) + O(h), \end{aligned}$$

1. Задача численного дифференцирования

Полная погрешность

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

1. Задача численного дифференцирования

Оптимальный шаг дифференцирования

$$k = \max |f(x)|, \quad M_2 = \max |f''(x)|.$$

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

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

1. Задача численного дифференцирования

Формула второго порядка

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

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

1. Задача численного дифференцирования

Оптимальный шаг для формулы второго порядка (2)

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

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

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

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

$$\frac{1}{h} \sum_{k=-l}^m \alpha_k f(x_j + kh) = \frac{1}{h} f(x_j) \sum \alpha_k + f'(x_j) \sum k \alpha_k + f''(x_j) h \sum \frac{k^2}{2} \alpha_k +$$
$$+ f'''(x_j) h^2 \sum \frac{k^3}{6} \alpha_k + \dots + f^{(n)}(x_j) h^{n-1} \sum \alpha_k \frac{k^n}{n!} + \dots$$

1. Задача численного дифференцирования

Система линейных уравнений метода неопределенных коэффициентов

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

$$\sum \alpha_k \frac{k^2}{2} = 0, \quad \dots \quad \sum \alpha_k \frac{k^n}{n!} = 0,$$

1. Задача численного дифференцирования

Система

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

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 $O(h^{N+1-p})$

.