МГТУ имени Н.Э. Баумана
Кафедра ИУ-1 «Системы автоматического управления»

Методы вычислений

Введение

Андрей Леонидович Масленников
amas@bmstu.ru

2023 г.

Методы вычислений

План дисциплины

Разделы курса:

1. Вычислительные задачи, основы теории погрешностей, основы теории численных методов
2. Численные методы векторно-матричных преобразований
3. Численные методы матричных разложений
4. Численные методы решения СЛАУ
5. Численные методы интерполирования функций
6. Численные методы интегрирования функций
7. Численные методы решения задачи Коши
8. Численные методы дифференцирования функций
9. Численные методы решения задач оптимизации

Программное обеспечение:

1. MathWorks MATLAB & Simulink
2. SciLab
3. GNU Octave

Критерии оценивания:

М	КМ	min	max
1	РК1	21	35
	ЛР1	3	5
	ЛР2	3	5
	ДЗ1	3	5
2	РК2	21	35
	ЛР3	3	5
	ЛР4	3	5
	ДЗ2	3	5
Зачет		60	100

- РК пишутся на лекциях
- На РК можно использовать «шпору» А5
- Список вопросов в Syllabus.pdf
- Отчеты по ЛР не требуются
- ДЗ сдаются семинаристу

Методы вычислений

Рекомендуемая литература

Основная литература:

1. Андреев В.Б. Численные методы. Учебное пособие. И.: Макс-пресс, 2013, 337 с.
2. Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В. Вычислительные методы. Учебное пособие. И.: Лань, 2014, 672 с.
3. Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. Учебник. И.: Бином. Лаборатория знаний, 2017, 640 с.
4. Белов С.А., Злотых Н.Ю. Численные методы линейной алгебры. Лабораторный практикум. И.: Нижегородский государственный университет, 2005, 58 с.
5. Вержбицкий В.М. Основы численных методов. И.: Высшая школа, 2002, 840 с.
6. Воеводин В.В., Кузнецов А.Ю. Матрицы и вычисления. И.: Наука, 1984, 320 с.
7. Галеев Э.М., Тихомиров В.М. Оптимизация. И.: Эдиториал УРСС, 2000, 320 с.
8. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения / пер. с англ. Х.Д. Икрамова. И.: Мир, 2001, 430 с.
9. Семушкин М.В. Численные методы алгебры. И.: Ульяновский государственный технический университет, 2006, 176 с.
10. Фаддеев Д.К., Фаддеева В.Н. Вычислительные методы линейной алгебры. 4-е издание. И.: Лань, 2009, 736 с.

Литература по MathWorks MATLAB:

1. Васильев А.Н. MatLAB. Самоучитель. Практический подход. 2-е издание. И.: Наука и Техника, 2015, 448 с.
2. Гилат А. MATLAB. Теория и практика. 5 издание / пер. с англ. Смоленцев Н.К. И.: ДМК Пресс, 2016, 416 с.

Вычислительные задачи

Вычислительная задача — это одна из трех типов математических задач решение которой необходимо получить численно.

Математическая модель — это идеализированное представление, обладающее определенной (достаточной для решения задачи моделирования) степенью адекватности (подобия), исследуемой системы (объекта, процесса).

Типы математических задач:

1. прямая;
   непосредственное вычисление решения
2. обратная;
   определение начальных данных по решению
3. идентификация.
   определение параметров математической модели

Методы решения вычислительных задач:

1. аналитические;
2. численные.
   как на компьютере с помощью программ и алгоритмов, так и «ручками»

Виды математических задач:

1. корректно и некорректно поставленные задачи;
2. хорошо и плохо обусловленные задачи.

Вычислительные задачи

Корректно и некорректно поставленные математические задачи

Корректность — это характеристика математической задачи, для которой математическая модель обладает рядом свойств.

Свойства корректно поставленных задач:

1. решение задачи существует при любых входных данных;
   например, поиск обратной матрицы невозможен для исходной матрицы с отрицательным детерминантом
2. решение обладает свойством единственности;
   множество решений не представляет никакого интереса для последующего анализа
3. решение устойчиво по отношению к малым изменениям входных данных.
   решение не уходит в $\pm\infty$, а локализовано в некоторой δ-окрестности

Некорректность задачи, как правило, означает неверно выбранную математическую модель, неверно заданные или некорректные начальные условия и неверно выбран численный метод решения и/или его параметры.

Жак Адамар
1865 – 1963

французский математик и механик

Вычислительные задачи

Хорошо и плохо обусловленные математические задачи

Обусловленность — это характеристика математической задачи, которая показывает насколько решение задачи чувствительно по отношению к погрешностям входных данных.

Хорошо обусловленная задача — это задача в которой малым погрешностям входных данных соответствуют малые погрешности решения.

Плохо обусловленная задача — это задача в которой малым погрешностям входных данных <u>могут</u> соответствовать большие погрешности в решении.

Число обусловленности — это коэффициент, характеризующий возможное возрастание погрешностей решения по отношению к погрешностям входных данных

Соотношение погрешностей:

$$\Delta y = \nu_\Delta \Delta x$$

$$\delta y = \nu_\delta \delta x$$

ν_Δ — абсолютное число обусловленности

ν_δ — относительное число обусловленности

Δy — абсолютная погрешность решения

Δx — абсолютная погрешность входных данных

δy — относительная погрешность решения

δx — относительная погрешность входных данных

$\nu_\Delta \gg 1$ или $\nu_\delta \gg 1$ — плохо обусловленная задача

Методы решения вычислительных задач

Аналитические методы — это методы получения решения в буквенно-символьном виде включая различные математические преобразования исходной задачи.

Особенности (как правило):

1. не эффективны по быстродействию;
2. получаемое решение имеет нулевую погрешность;
3. не всегда решение задачи можно получить аналитически;
4. не могут применяться в автономных технических системах;
5. не применимы для решения современных сложных технических задач.

Численные методы — это алгоритмы и их реализации для решения математических задач, когда получаемый результат получается в виде, как правило, набора чисел.

Особенности:

1. точность и быстродействие полученного решения зависит от различных факторов и настроек алгоритмов;
2. идеально точного решения получить нельзя;
3. могут не приходить к истинному решению.

Варианты применения:

1. на бумаге «ручками»;
2. с использованием ЭВМ.

Для численных методов актуален вопрос сходимости и устойчивости

Численные методы

Требования к разработке алгоритмов:

1. достаточный уровень быстродействия;
   минимальность вычислительных операций
2. достижимость истинного решения;
   единственность, устойчивость и сходимость
3. минимальность ошибки вычислений.
   теоретической ошибки

Требования к реализации алгоритмов:

1. минимизация временной вычислительной сложности;
   минимизация времени получения решения
2. минимизация пространственной вычислительной сложности.
   минимизация ресурсов ЭВМ для получения решения, включая объем RAM, HDD/SSD и т.п.

Классификация численных методов:

1. методы эквивалентных преобразований;
2. методы аппроксимации;
3. прямые методы;
4. итерационные методы;
5. стохастические методы.

Не так сложны и страшны численные методы, как лабораторные по ним

Численные методы

Виды численных методов

Метод эквивалентных преобразований:
Исходная задача (ее постановка, начальные данные, математическое описание) заменяется на другую, имеющую тоже решение. Как правило, метод используется тогда, когда в исходной постановке задача не может быть решена, либо в новой постановке процесс получения решения более эффективен.

Пример:

- вычисление обратной матрицы через алгоритмы матричных разложений.

Прямые методы:
Решение задачи получается за конечное число вычислительных операций, которое в общем случае зависит от размера входных данных.

Пример:

- решение СЛАУ методом Крамера.

Метод аппроксимации:
Исходная задача (ее постановка, начальные данные, математическое описание) заменяется (аппроксимируется) на другую, имеющую решение близкое к исходной. Неточность аппроксимации проявляется в появлении в результатах вычислений ошибки аппроксимации.

Пример:

- численное вычисление интеграла функции, когда подынтегральная функция заменяется на последовательность более простых функций;
- замена нелинейных функционалов на линейные за счет процедуры линеаризации.

Численные методы

Виды численных методов

Итерационные методы:
Решение задачи получается с помощью построения итерационного процесса, т.е. некоторого процесса приближения к истинному решению, где количество итераций, в общем смысле, не фиксировано.

Критерии выхода из итерационного процесса:

- количество произведенных итераций превысило заданное максимальное;
- разность решений на текущем и предыдущем шагах меньше заданной точности;
- разность некоторых функционалов, зависящих от решений, на текущем и предыдущем шагах меньше заданной точности

Для итерационных методов крайне актуален вопрос сходимости всего процесса к истинному решению при заданных начальных условиях

Стохастические методы:
Решение задачи получается с помощью моделирования случайных экспериментов, как правило, многократного, и построении (вычислении) статистических оценок.

Особенности:

- требуют большего объема ОЗУ;
- требуют больше времени на решение задачи;
- применимы для современных сложных вычислительных задач.

Пример:

- интегрирование функций методом Монте-Карло
- популяционные методы оптимизации.
  генетические алгоритмы, алгоритмы роя частиц, муравьиные алгоритмы и др.

Численные методы

Погрешности вычисления решений

Причины возникновения погрешностей:

1. неточность математической модели;
   например, в случае аппроксимации или линеаризации
2. неточность задания начальных значений;
   в меньшей степени относится непосредственно к численному методу
3. неточность, заложенная в самом методе;
   например, в итерационных методах где решение заканчивается по достижению заданной точности
4. погрешности связанные с машинной арифметикой;
   в памяти вычислителя есть конечная разрешающая способность при хранении чисел с плавающей точкой
5. ошибки округления.
   в большей степени относятся к представлению данных оператору

Неустранимые погрешности — это погрешности, связанные с начальными данными и неточностью математической модели. Эти погрешности нельзя устранить численным методом

Устранимые погрешности — это погрешности, связанные с самим численным методом, которые можно снизить за счет его настройки или замены.

Основы теории погрешностей

Погрешность решения — это (в скалярном или векторном виде) определения решения математической задачи численным методом - это величина отклонения полученным решением y и истинным y_0.

Виды погрешностей:

1. относительная;
2. абсолютная;
3. приведенная (нормированная).

Точность решения в качественных рассуждениях — это противоположность погрешности, однако на практике, как правило, речь идет об одних и тех же характеристиках.

Абсолютная погрешность: $\Delta y = |y - y_0|$

Относительная погрешность: $\delta y = \dfrac{|y - y_0|}{y} = \dfrac{\Delta y}{y}$

Приведенная погрешность: $\Delta_\gamma y = \dfrac{\bar{\Delta} y}{\gamma}$

Δy — некоторый коэффициент

$\bar{\Delta} y$ — верхняя абсолютная граница погрешности

y_0 — истинное значение решения

Верхние границы погрешностей:

$$|y - y_0| \le \bar{\Delta} y$$

$$\frac{|y - y_0|}{y} \le \bar{\delta} y$$

Вычисление погрешностей на практике невозможно, т.к. истинные значения решений a priori неизвестны

Основы теории погрешностей

Погрешности, связанные с машинной арифметикой

Значащие цифры числа y — это все (и целые и дробные) цифры в его записи, начиная с первой не нулевой для числа, заданного в виде конечной десятичной дроби:

$$y = \alpha_n \alpha_{n-1} \cdots \alpha_0 \,.\, \beta_0 \beta_1 \cdots \beta_m$$

Верные значащие цифры числа y — это те цифры разряд которых меньше величины верхней границы абсолютной погрешности

Пример: $\Delta y = 2 \times 10^{-6}$

$$y = 0.010300$$

Вычисление числа π при одинарной точности:

$$\pi = 3.14159265358979323846264 3$$

Вычисление числа π при двойной точности:

$$\pi = 3.141592653589793238462643$$

Взаимосвязь количества значащих цифр с величиной относительной погрешности:

- если y содержит N_y верных значащих цифр, то:

$$\delta y \le \left(10^{N_y - 1} - 1\right)^{-1} \approx 10^{1 - N_y}$$

- для того, чтобы y содержало N_y верных значащих цифр, необходимо:

$$\delta y \le \left(10^{N_y} + 1\right)^{-1} \approx 10^{-N_y}$$

- если y содержит ровно N_y верных значащих цифр, то:

$$10^{-N_y - 1} \le \delta y \le 10^{N_y + 1}$$

Пример:

$$y = 3.14$$

$$y_0 = 3.14159$$

$$\Delta y = |y - y_0| = 0.00159$$

$$\bar{\Delta} y = 0.0016$$

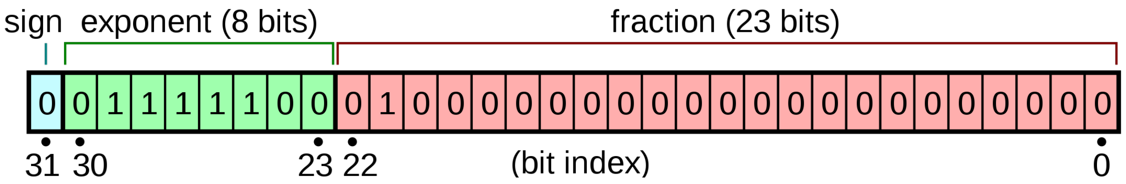
$$\bar{\delta} y = 0.0016 / 3.14 = 0.0051$$

$$\delta y = 10^{-3} = 0.001$$

Основы теории погрешностей

Погрешности, связанные с машинной арифметикой

Погрешности связанные с машинной арифметикой — это погрешности обусловленные разрешающей способностью вычислителя при хранении и операциями с числами с плавающей точкой.



Числа с плавающей точкой бывают:

Бит	Бит мантиссы	Бит экспоненты	Значащих цифр N_y
16	11	5	3
32	24	8	7
64	53	11	15
128	114	15	34
256	237	19	71

Для чисел с одинарной точностью:

$$\delta y \approx 2^{-N_{y,32b}} = 2^{-24} \approx 5.9605 \times 10^{-8}$$

$$N_y = 7$$

Для чисел с двойной точностью:

$$\delta y \approx 2^{-N_{y,64b}} = 2^{-53} \approx 1.1102 \times 10^{-16}$$

$$N_y = 15$$

Расчет числа: $y = (-1)^S C b^Q$

S — знак (1 для отрицательных чисел)

b — основание (2 или 10)

Q — порядок (степень), причем первый бит - знак

C — мантисса

IEEE — Institute of Electrical and Electronics Engineers
IEEE 754 — Standard for Floating-Point Arithmetic

Вычислительная сложность алгоритмов

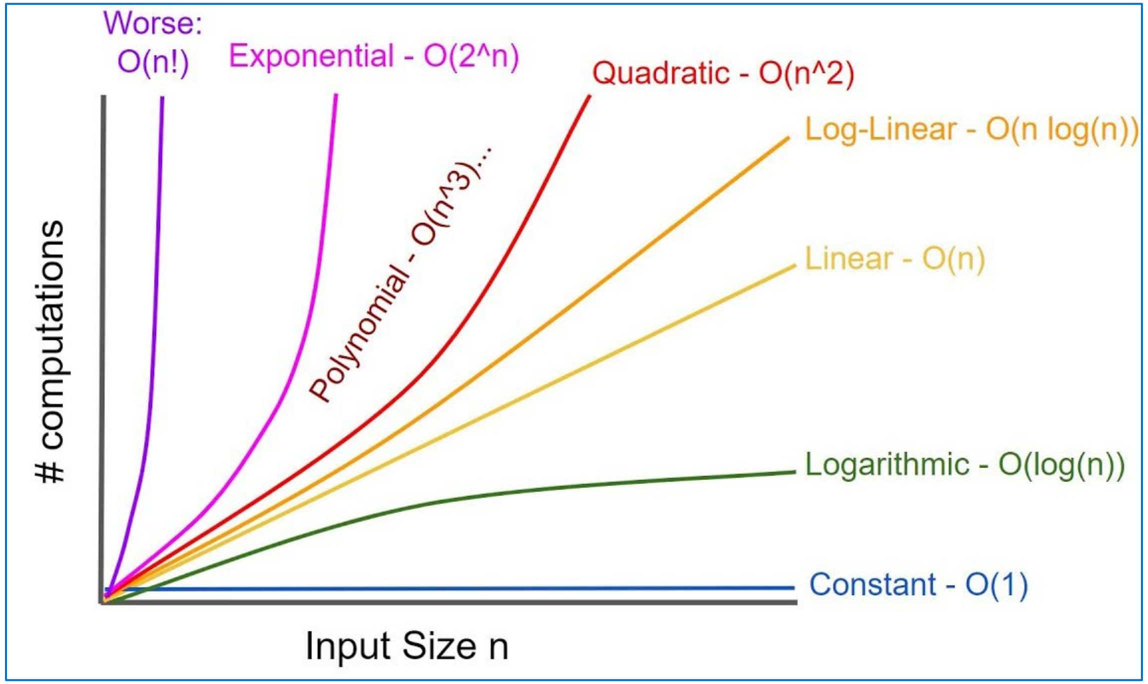
Вычислительная сложность — это функция зависимости объема работы алгоритмы или затрачиваемых на его работу ресурсов от объема входных данных.

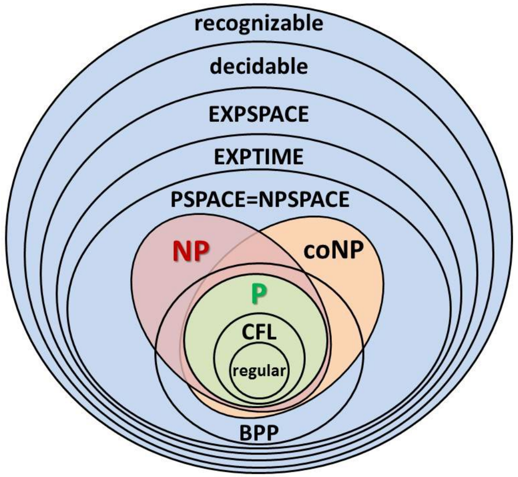
Выделяют два вида вычислительной сложности:

1. временная;
   количество операций, затрачиваемое алгоритмом на решение задачи
2. пространственная.
   объем RAM, HDD и т.п., затрачиваемых алгоритмом на решение задачи

Виды временной сложности:

1. константное время $\mathcal{O}(1)$;
2. линейное время $\mathcal{O}(n)$;
3. квадратичное время $\mathcal{O}(n^2)$;
4. логарифмическое время $\mathcal{O}(\log n)$;
5. (P) полиномиальное время $2^{\mathcal{O}(\log n)} = \text{poly}(n)$;
6. (QP) квазиполиномиальное время $2^{\text{poly}(\log n)}$;
7. (E) экспоненциальное время $2^{\mathcal{O}(n)}$;
8. (EXPTIME) экспоненциальное время $2^{\text{poly}(n)}$ и др.





ANIMUS v2.0 DATABASE

Special Memory…

Когда-то… Все сидели на ПП (параллельное программирование), ну или — Полный ……
На смену ПП пришли Методы… Методы ~~от~~вычислений