Вычислительная математика

Погрешности вычислений и численное дифференцирование

Цыбулин Иван (tsybulin@crec.mipt.ru (mailto:tsybulin@crec.mipt.ru))

Организация курса

- Курс рассчитан на 2 семестра
- В каждом семестре 2 контрольные — полусеместровая на семинаре и семестровая на лекции
- После каждой контрольной сдача задания

БРС

- Посещение лекций - 10 баллов
- Полусеместровая контрольная - 20 баллов
- Семестровая контрольная - 30 баллов
- Каждое задание - 20 баллов
  - Решенные задачи из задавальника - 10 баллов
  - Лабы по темам или задачи для программирования - 10 баллов
- Активность на семинарах - до 10 баллов
  - Работа у доски
  - Задачи после семинаров

Оценка = Баллы / 10 округленные вниз

Материалы

- Курс на сайте кафедры (https://mipt.ru/education/chair/computational_mathematics/study/materials/compmath/)
- Репозиторий с презентациями на GitHub (https://github.com/CompMathGroup/compmath-slides)
- Группа ВК (https://vk.com/mipt_compmath)

Предмет вычислительной математики

Разделы вычислительной математики

- Численный анализ
- Вычислительная линейная алгебра
- Численное решение диффуров

Для вычислительных задач ответом обычно является *число*, а также *погрешность* ответа.

Машинная арифметика

Вычислительная техника оперирует числами с конечным числом (двоичных) цифр (числа с плавающей точкой, floating-point values)

$$x = \pm\overline{1.b_1 b_2 \dots b_K} \cdot 2^e$$

Сравните с научной нотацией для записи чисел

$$x = 1.2345 \cdot 10^6$$

Числа в машинном представлении имеют *фиксированное число значащих цифр* $K + 1$.

Погрешность машинного представления

Действительные числа в машинном представлении приходится округлять до K значащих цифр. при этом реальное число x находится где-то в диапазоне

$$x \in [X - \Delta X, X + \Delta X], \qquad X = \pm\overline{1.b_1 b_2 \dots b_K} \cdot 2^e$$
$$\Delta X \leqslant \frac{1}{2} 2^{-K} \cdot 2^e \leqslant |X| \cdot 2^{-K-1}$$

Относительная погрешность представления чисел в арифметике с плавающей точкой фиксированна:

$$\frac{\Delta X}{|X|} \leqslant \delta = 2^{-K-1}$$

Одинарная и двойная точность

Стандартом IEEE определяются несколько форматов представления чисел в компьютере. Самыми распространенными являются

- одинарная точность, single precision (`float` в C). Имеет $K = 23$ и обеспечивает относительную точность $\delta = 2^{-24} \approx 5.96 \cdot 10^{-8}$
- двойная точность, double precision (`double` в C). Имеет $K = 52$ и обеспечивает относительную точность $\delta = 2^{-53} \approx 1.11 \cdot 10^{-16}$

Погрешность при вычислении функции

Пусть x^* — результат измерения величины x с погрешностью Δx (то есть $|x^* - x| \leqslant \Delta x$). Пусть также $f(x)$ — некоторая функция. Интересует насколько $y = f(x)$ может отличаться от $y^* = f(x^*)$.

Воспользуемся формулой Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа

$$f(x) = f(x^*) + f'(\xi)(x - x^*), \quad \xi \in [x, x^*]$$

Отсюда следует оценка $|y - y^*| \leqslant |f'(\xi)|\Delta x$, содержащая неизвестную точку ξ.

$$|y - y^*| \leqslant |f'(\xi)|\Delta x \leqslant \Delta x \cdot \max_{\xi \in [x^* - \Delta x, x^* + \Delta x]} |f'(\xi)|$$

Из формулы Тейлора в форме Коши

$$f(x) = f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*) + O((x - x^*)^2)$$

также можно получить оценку, если пренебречь слагаемым $O(\Delta x^2)$.

В этом случае оценка имеет вид

$$f(x) \approx f(x^*) + f'(x^*)(x - x^*)$$
$$|y - y^*| \lesssim |f'(x^*)|\Delta x$$

Эта оценка погрешности — приближенная, она позволяет составить представление об ошибке, но пользоваться ей необходимо аккуратно. Например, если вдруг $f'(x^*) = 0$, эта оценка теряет смысл.

Приближенные методы

Многие методы вычислительной математики являются приближенными, то есть позволяют получить ответ с заданной точностью. Крайне важно уметь определять погрешность, обусловленную использованием приближенного метода. Такая погрешность называется **ошибкой метода**.

Например, рассмотрим метод вычисления функции e^x, основанный на формуле Тейлора в окрестности $x = 0$.

$$e^x \approx 1 + x + \frac{x^2}{2} + \dots = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^k}{k!}.$$

Отметим, что число n является параметром метода.

Суммирования ряда Тейлора

С помощью формулы Тейлора с остаточным членов в форме Лагранжа удается оценить ошибку такого метода:

$$S_n = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{x^k}{k!}$$

$$e^x = 1 + x + \dots + \frac{x^{n-1}}{(n-1)!} + e^{\xi} \frac{x^n}{n!}, \quad \xi \in [0, x]$$

$$|e^x - S_n| \leqslant \max(1, e^x) \frac{|x|^n}{n!} \equiv \varepsilon_{\text{method}}$$

Несложно видеть, что при $n \to \infty$ ошибка метода стремится к нулю.

Если ряд является знакопеременным, как например, для функции $\sin x$

$$\sin x \approx S_n = x - \frac{x^3}{6} + \frac{x^5}{120} + \dots = \sum_{k=0}^{n-1} (-1)^k \frac{x^{2k+1}}{(2k+1)!},$$

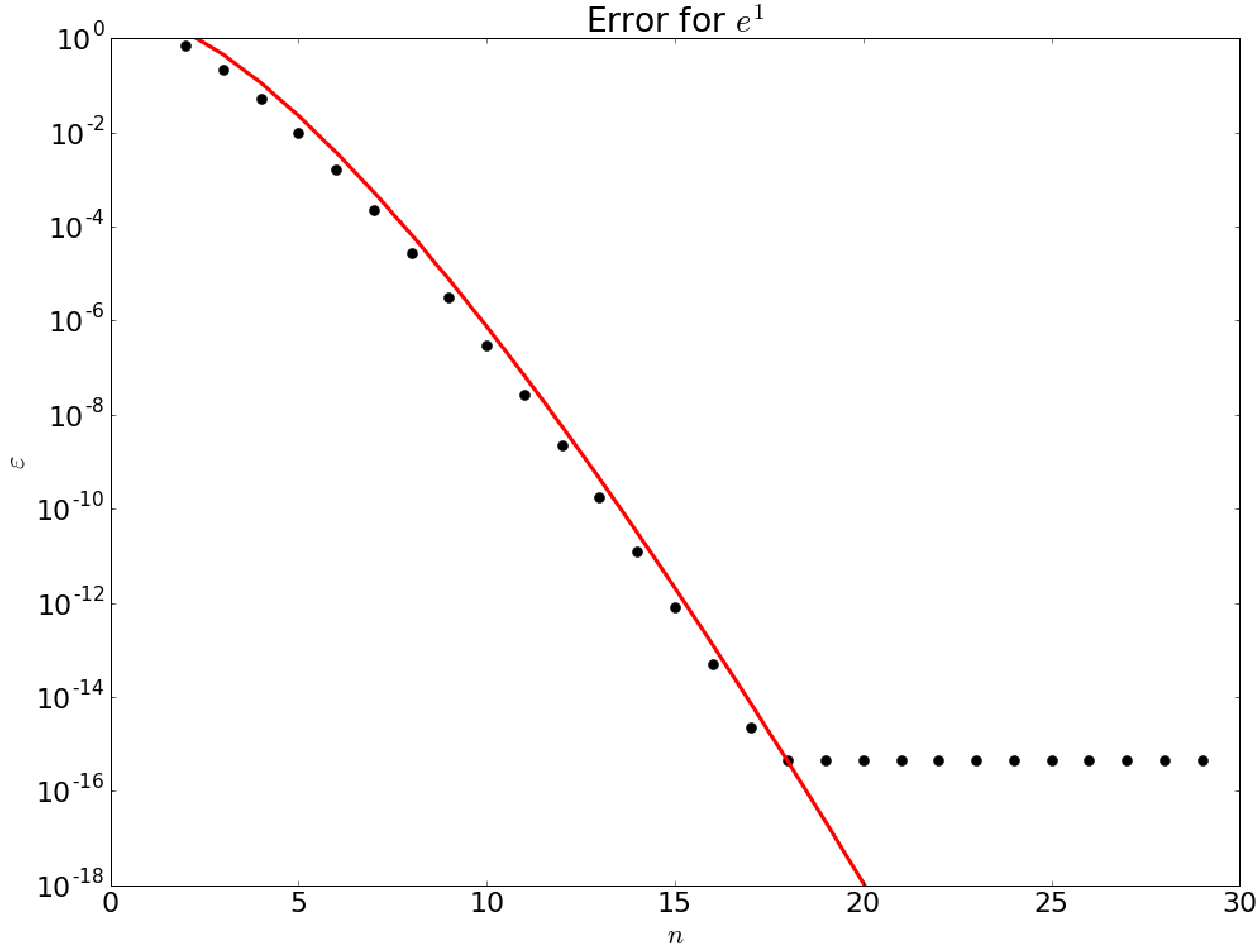
в качестве ошибки метода можно использовать первое отброшенное слагаемое:

$$|\sin x - S_n| \leqslant \left| \frac{x^{2n+1}}{(2n+1)!} \right|.$$

Такая оценка справедлива, если все отброшенные слагаемые знакопеременного ряда монотонно убывают по модулю.

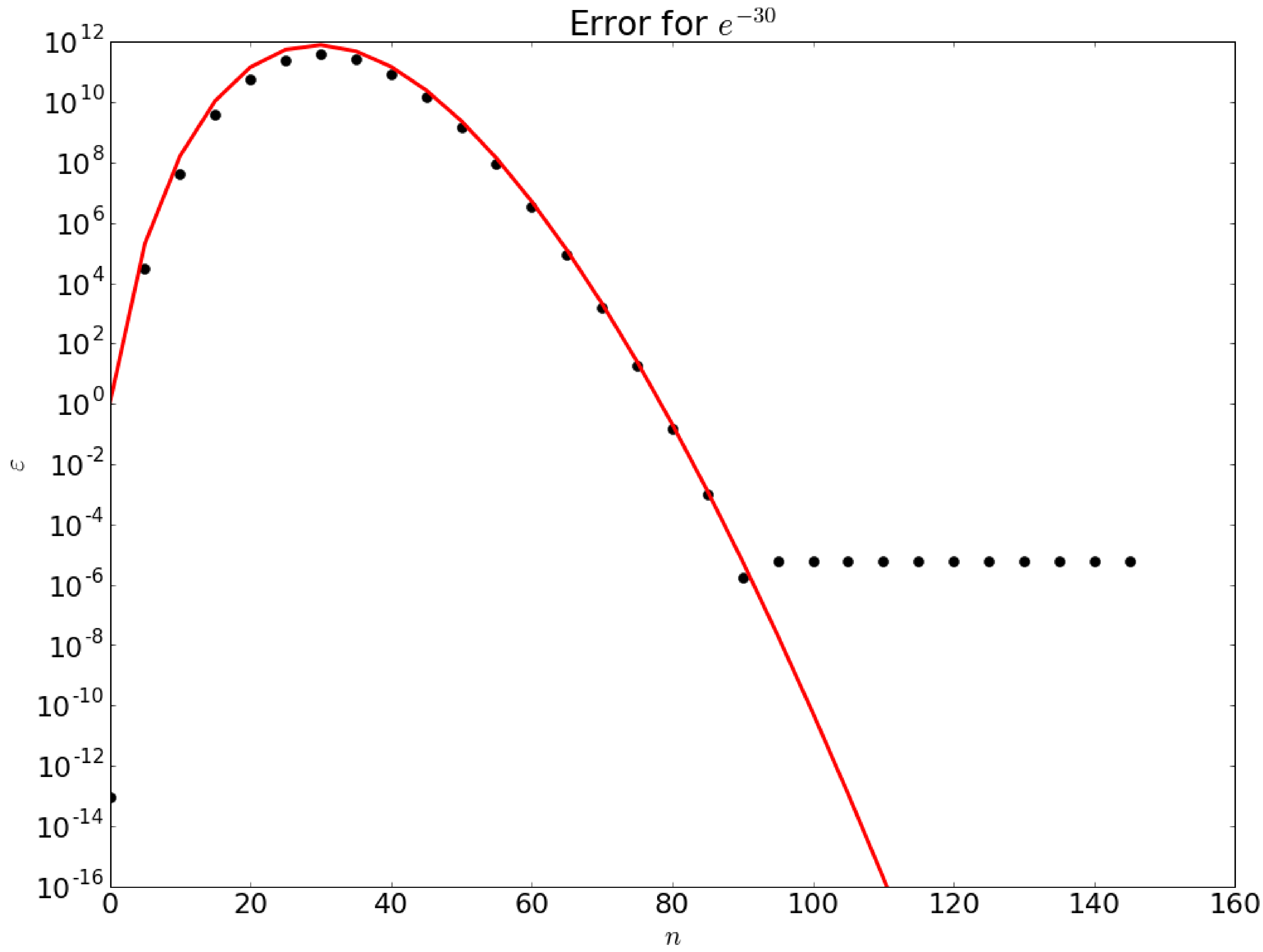
In [1]:
```
def myexp(x, n):
    S = 0.
    a = 1.
    for k in range(n):
        S += a
        a *= x / (k + 1)
    return S
```

In [2]: Show code



Error for e^1
10^0
10^{-2}
10^{-4}
10^{-6}
10^{-8}
10^{-10}
10^{-12}
10^{-14}
10^{-16}
10^{-18}
ε
0
5
10
15
20
25
30
n

In [3]: Show code


Error for e^{-30}
ε
n
10^{12}
10^{10}
10^{8}
10^{6}
10^{4}
10^{2}
10^{0}
10^{-2}
10^{-4}
10^{-6}
10^{-8}
10^{-10}
10^{-12}
10^{-14}
10^{-16}
0
20
40
60
80
100
120
140
160

Накопление ошибок округления

Суммируя величину $S_n = \sum\limits_{k=0}^{n-1} a_n$ в машинной арифметике, мы на самом деле суммируем *округленные* величины. Каждое слагаемое a_n представлено с абсолютной погрешностью $\Delta a_n \leqslant |a_n| \cdot \delta$, где δ — относительная ошибка округления.

Так как при суммировании чисел их абсолюная погрешность суммируется, при вычислении S_n накопится ошибка

$$\Delta S_n \leqslant \varepsilon_{\text{round}} = \sum_{k=0}^{n-1} |a_n| \cdot \delta = \delta \cdot \sum_{k=0}^{n-1} |a_n|.$$

При вычислении $e^{-30} \approx 9.35 \cdot 10^{-14}$ в худшем случе накапливается ошибка

$$\varepsilon_{\text{round}} = \delta \cdot \sum_{k=0}^{n-1} \frac{|x|^k}{k!} \approx \delta \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|x|^k}{k!} = \delta e^{|x|} \approx 1.1 \cdot 10^{-3}$$

Фактически, ошибка превосходит результат на 10 порядков.

Заметим, что для знакопостоянного ряда такого случиться не могло:

$$\Delta S_n \leq \delta \sum_{k=0}^{n-1} |a_n| = \delta \left| \sum_{k=0}^{n-1} a_n \right| = \delta |S_n| \implies \frac{\Delta S_n}{|S_n|} \leq \delta.$$

Численное дифференцирование

Дана функция $f(x)$ в виде черного ящика: ее можно вычислять в различных точках x и получать резлультат с погрешностью Δf. Известно, что функция достаточно гладкая, но конкретный вид функции не задан. Необходимо получить значение ее производной $f'(x)$ в точке x_0.

Вспомним определение производной

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

Конечные разности

Рассмотрим в качестве приближенного метода

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h}$$

при некотором значении $h > 0$. Интуитивно понятно, что чем меньше h, тем точнее метод. Покажем это, найдя ошибку метода. Для этого нужно оценить величину

$$\left| f'(x_0) - \frac{f(x_0+h) - f(x_0)}{h} \right|$$

Оценка ошибки метода для конечных разностей

Воспользуемся формулой Тейлора с остаточным членом в форме Лагранжа:

$$f(x_0+h)=f(x_0)+f'(x_0)h+\frac{f''(\xi)}{2}h^2,\ \ \xi\in[x_0,x_0+h].$$

$$\left|f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}\right|=\frac{|f''(\xi)|h}{2}.$$

Пусть известно, что $\left|f''(\xi)\right|\leq M_2$. Тогда ошибку метода можно оценить как

$$\left|f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}\right|\leqslant\varepsilon_{\text{method}}=\frac{M_2h}{2}.$$

Из оценки

$$\left|f'(x_0)-\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}\right|\leqslant\varepsilon_{\text{method}}=\frac{M_2h}{2}.$$

видно, что ошибка метода стремится к нулю при $h\to 0$, причем $\varepsilon_{\text{method}}=O(h)$.

Говорят, что данный метод имеет *первый порядок*, так как его ошибка стремится к нулю как первая степень величины h, которую называют *шагом дифференцирования*

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

Пользуясь такими же разложениями

$$f(x_0 \pm h) = f(x_0) \pm f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)}{2}h^2 \pm \frac{f'''(\xi_{1,2})}{6}h^3,$$
$$\xi_1 \in [x_0 - h, x_0], \xi_2 \in [x_0, x_0 + h],$$

заключаем, что

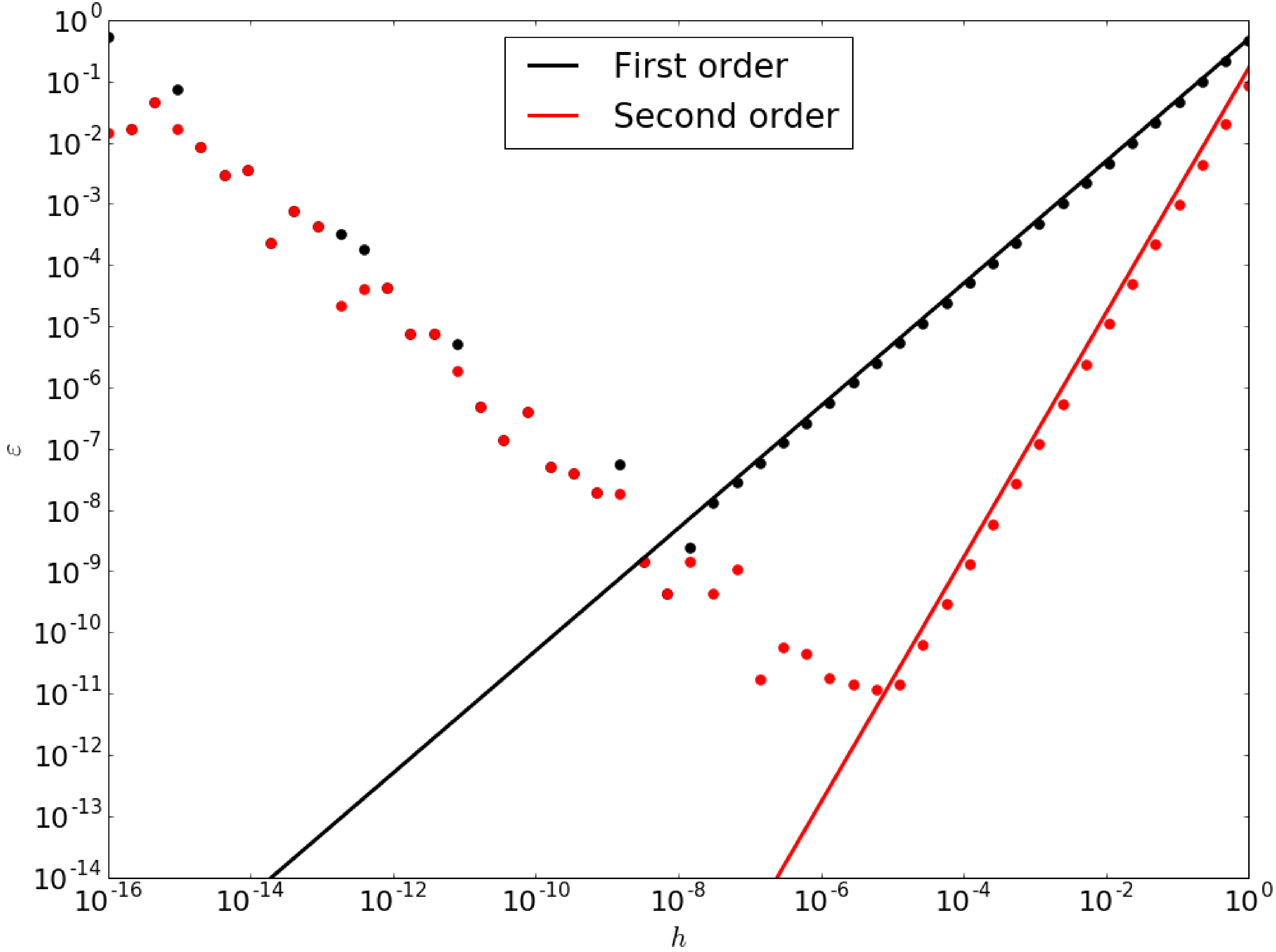
$$\left| f'(x_0) - \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} \right| = \frac{|f'''(\xi_2) + f'''(\xi_1)|h^2}{12},$$
$$\left| f'(x_0) - \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} \right| \leqslant \varepsilon_{\text{method}} = \frac{M_3 h^2}{6}, \qquad M_3 = \max |f'''(\xi)|$$

Отметим, что данный метод имеет *второй порядок*, так как $\varepsilon_{\text{method}} = O(h^2)$.

In [4]:
```
def diff1(f, x0, h):
    return (f(x0 + h) - f(x0)) / h

def diff2(f, x0, h):
    return (f(x0 + h) - f(x0 - h)) / (2 * h)
```

In [5]: Show code



Погрешности при дифференцировании

Вспомним, что функция $f(x)$ вычисляется с погрешностью Δf. При вычислении

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}$$

из-за приближенных значений $f(x_0+h)$ и $f(x_0)$ появляется ошибка

$$\varepsilon_{\text{comp}} = \frac{2\Delta f}{h}$$

соответственно. Эта ошибка при уменьшении h *растет* как $O(h^{-1})$.

Оптимальный шаг дифференцирования

При дифференцировании функции имеются два основных источника погрешности

- Ошибка метода — уменьшается при уменьшении h
- Ошибка вычислений — растет при уменьшении h

Поскольку характер роста ошибок различный, существует неокторое значение h^*, при котором ошибка минимальна. Рассмотим полную ошибку

$$\varepsilon_{\text{total}} = \varepsilon_{\text{method}} + \varepsilon_{\text{comp}}$$

как функцию от h и найдем минимум.

Продифферецируем полную ошибку

$$\varepsilon_{\text{total}}(h) = \frac{M_2 h}{2} + \frac{2\Delta f}{h}$$

по h:

$$0 = \varepsilon'_{\text{total}}(h^*) = \frac{M_2}{2} - \frac{2\Delta f}{{h^*}^2}$$

$$h^* = 2\sqrt{\frac{\Delta f}{M_2}}$$

Для функции $f(x) = \sin x$ оценки производных $M_2 = M_3 = 1$. Также примем $\Delta f = 10^{-16}$. При этом

$$h^* = 2 \cdot 10^{-8}, \qquad \varepsilon^*_{\text{total}} = 2 \cdot 10^{-8}$$

Проделав то же самое для формулы дифференцирования второго порядка, получаем

$$\varepsilon_{\text{total}}(h) = \frac{M_3 h^2}{6} + \frac{2\Delta f}{2h}$$

по h:

$$0 = \varepsilon'_{\text{total}}(h^*) = \frac{M_3 h^*}{3} - \frac{\Delta f}{{h^*}^2}$$

$$h^* = \sqrt[3]{\frac{3\Delta f}{M_3}}$$

При тех же значениях M_2, M_3 и Δf получаем

$$h^* \approx 6.69 \cdot 10^{-6}, \qquad \varepsilon^*_{\text{total}} \approx 2.24 \cdot 10^{-11}$$

Хорошо видно, что метод второго порядка позволил добиться более высокой точности при большем шаге дифференцирования.

Методы повышеного порядка обычно позволяют

- добиться большей точности при меньших вычислительных затаратах
- получить более точный результат в рамках той же точности вычислений