Лекція 1: ВСТУП. .

Кроки розв'язування практичних задач. Програмні продукти для аналітичного та чисельного роз'язування математичних моделей практичних задач. Джерела похибок наближених обчислень.

У ході розв'язання конкретної практичної задачі з використанням комп'ютера спеціаліст повинен, як правило, виконати наступні кроки: 1) постановка задачі (словесне формулювання; визначення конкретної мети розв'язування); 2) побудова математичної моделі задачі – система математичних співвідношень, що повністю описують предмет задачі; 3) вибір методу розв'зування задачі (аналітичний чи числовий; обробка даних експерименту тощо); 4) розробка та програмна реалізація алгоритму розв'язування рівнянь математичної моделі задачі; 5) проведення розрахунків та їх аналіз.

Відразу слід зазначити, що ключовим для успішного розв'язування задачі є крок 2 – побудова математичної моделі. Тут повинна бути вирішена дилема: 1) вибір занадто детальної чи дріб'язкової моделі може призвести до надто складної та громіздкої системи математичних рівнянь, яку важко розв'язати більш-менш точно навіть з допомогою чисельних методів; 2) одночасно, якщо математична модель вибрана недостатньо коректною та адекватною, то які б методи не застосовувалися для розрахунків з її використанням, отримані висновки будуть ненадійні, або й зовсім неправильні. Для знаходження «золотої середини» у цій дилемі слід керуватися здоровим глуздом, практичним досвідом побудови аналогічних і вже апробованих моделей.

Крок 3 визначається з аналізу системи математичних співвідношень, отриманої на кроці 2.

Кроки 4 та 5 доцільно виконувати з використанням розвинутих професійно математичних пакетів програм, як от Mathematica, Maple, MatLab, MathCad, Scilab, Octave, R тощо. Вибір пакету залежить від потреб та можливостей користувача. Перевагами пакетів Mathematica та Maple є можливість проводити символьні (аналітичні) перетворення для удосконалення математичної моделі задачі з метою її розв’язку в діалоговому режимі. Пакети матричної математики MatLab та його аналог Scilab, а також пакет R, мають розвинуті мови програмування високого рівня, потужні бібліотеки готових програм-функцій, що реалізують різні чисельні методи. MathCad, Octave – це середовища для діалогового розв’язування математичних задач з візуальним інтерфейсом. Крім функціональних можливостей пакети комп’ютерної математики істотно відрізняються комерційною вартістю: якщо Mathematica, Maple, MatLab – це пропрієтарні програмні продукти з достатньо вагомою вартістю ліцензії, то Scilab і R є вільними програмними продуктами (Open Source), що поширюються з ліцензією GNU. Крім того, вони є кросплатформенними (Windows, Linux, macOS), постійно виходять їх нові версії та розширення, які доступні на офіційних сайтах https://www.scilab.org та http://cran.r-project.org.

1. Загальні поняття чисельних методів

Для розв'язування системи співвідношень математичних моделей задач можна виділити наступні групи методів:

1. *Аналітичні методи*, в яких розв'язок задачі отримано у вигляді аналітичних виразів. Їх перевагами є: запис розв'язку у загальному вигляді; висока точність і малий об'єм комп'ютерної пам'яті для зберігання розв'язку. Основний недолік – неуніверсальність, бо тільки невелика частина математичних задач може бути розв'язана аналітично.

2. *Графічні методи*, в яких розв'язок задачі знаходиться візуально. Їх перевагою є наочність. Недоліками графічних методів є низька точність та неуніверсальність.

3. *Чисельні методи*, що дозволяють звести розв'язування задачі до виконання скінченного числа арифметичних і логічних дій з числами. При цьому розв'язок визначається як набір чисел, які надалі можуть бути

інтерпретовані різним способом (наприклад, подані у вигляді таблиць, графіків, анімації тощо). Їх перевагами є: абсолютна універсальність, бо теоретично вони можуть бути застосовані для розв'язання будь-яких задач; добре пристосовані для реалізації на комп'ютері. Недоліком є громіздкість при ручних рахунках, якщо виникає така необхідність. Таким чином, чисельні методи є основним апаратом розв'язання математичних задач, а їх значущість тільки збільшуватиметься у міру вдосконалення комп'ютерної техніки. Чисельні методи бувають двох типів: прямі та ітераційні. В прямих методах розв'язок задачі досягається за скінченну кількість кроків методу після виконання останнього кроку, в ітераційних методах виконується низка ітерацій (послідовних наближень, повторень повторення сукупності операцій або процедур) до отримання наближеного розв'язку із заданою точністю.

Для оцінки чисельних методів, тобто порівняння між собою методів для розв'язання однієї задачі, розглядають їх основні характеристики: *трудомісткість; порядок методу; збіжність; швидкість збіжності; стійкість до похибок обчислень; стійкість до похибок вхідних даних*.

Під *трудомісткістю* методу розуміють кількість і якість обчислень, необхідних для досягнення достатньо точного наближення розв'язку задачі. Під *порядком* методу розуміють вимоги до відомостей про функції, що входять у математичне формулювання задачі (наприклад, використання в методі похідних цих функцій): • метод нульового порядку, якщо він використовує тільки значення цих функцій; • метод першого порядку, якщо він використовує значення функцій і їх перших похідних; • метод другого порядку, якщо він використовує значення і функцій та їх перших і других похідних і т. д. Чисельний метод називається таким, що *збігається*, якщо наближення x_k прямує до точного розв'язку x^* зі зростанням кількості кроків наближення k. Очевидно, що методи, які не збігаються, не цікаві з прикладної точки зору. Тому одним з найважливіших етапів при введенні нового чисельного методу є теоретичне доведення його збіжності, тобто формулювання умов, за яких метод гарантовано збігається. Розрізняють різні швидкості збіжності – лінійну, квадратичну тощо. Поняття *стійкості збіжності* означає, що незалежно від похибок обчислень чи похибок у вхідних даних потрібний результат розв’язування буде отриманий.

2. Поняття похибки та її джерела

Для оцінювання точності результатів експерименту, розрахунку з допомогою чисельного методу вводяться поняття *абсолютної* і *відносної* похибки. Якщо ввести позначення x^* – точний розв'язок задачі, а x_k – певне наближення цього розв'язку, то *абсолютною* похибкою наближення x_k називають величину $\triangle x_k \geq \left| x^* - x_k \right|$, де норма $\left| x^* - x_k \right|$ – означає відстань між x^* і x_k. Таким чином, $\triangle x_k$ – це оцінка різниці між наближеним і невідомим точний розв'язок задачі. Відносною похибкою наближення x_k називають величину $\delta(x_k) \geq \dfrac{\left| x^* - x_k \right|}{\left| x_k \right|}$, яка теж має оціночний сенс.

Розв'язок, отриманий за допомогою будь якого чисельного методу, зазвичай є наближеним, тобто містить певну похибку. Тому в інженерній та науковій практиці переважно вживають висловлювання, що розв’язок отримано «з точністю …» . Можливими джерелами похибок є такі їхні види:

• невідповідність математичної постановки задачі досліджуваному реальному явищу, тобто неадекватність математичної моделі;

• похибка вхідних даних, які переважно отримані з експерименту і залежать від апаратних похибок приладів;

• похибка числового методу розв'язування;

• похибки заокруглення та обчислення.

Першу та другу із зазначених видів похибок ще називають неусувними, тобто такими, які закладені в результат задалегідь і не можуть бути усунені без покращення математичної постановки задачі та точніших вхідних даних.

Похибка методу пояснюється тим, що для розв'язування математичної задачі доводиться використовувати наближені методи, оскільки отримання точного розв'язку може вимагати необмеженої або неприйнятно великої кількості арифметичних операцій, і в багатьох випадках є неможливим.

Похибка обчислень виникає при оперуванні даними в комп'ютері внаслідок обмеження кількості значущих цифр у представленні мантиси числа в пам'яті комп'ютера.

Розглянемо процес заокруглення чисел на прикладі. Нехай маємо число x^*=4,167493. Заокруглюючи до п'яти десяткових знаків після коми матимемо x^*=4,16749, а до чотирьох – x^*=4,1675. Тобто, якщо старший розряд, що відкидається менше 5, то попередня цифра не змінюється, а якщо старший розряд, що відкидається дорівнює, або більше 5, то попередня цифра в числі збільшується на 1.

Зауваження. Інколи вважають, якщо старший розряд, що відкидається дорівнює 5, а попередня до нього цифра парна, то вона не змінюється, якщо ж попередня цифра непарна, то вона збільшується на одиницю.

Відзначимо, що при заокруглені цілого числа відкинуті знаки не можна заміняти нулями, а потрібно застосовувати множення на відповідний степінь основи 10.

Основна задача теорії похибок – знаходження області невизначеності результату, тому інформацію про абсолютну та відносну похибки можна використати для наступного представлення числа x^*:

$$x^* = x \pm \Delta(x),$$

$$x^* = x\left(1 \pm \delta(x)\right).$$

Значущими цифрами числа називаються всі цифри в його запису, починаючи з першої ненульової зліва.

Наприклад:

1. x=4,570345 – всі цифри в запису цього числа значущі;

2. x=0,007614 – значущі цифри тільки 7,6,1,4;

3. x=0,03105600 – значущі цифри 3,1,0,5,6,0,0 (два останні нулі в запису числа є значущими);

4. а) x=3750000 – всі цифри значущі;

б) $x=3{,}75\cdot10^{6}$ – значущі цифри тільки 3,7,5.

Значуща цифра називається *вірною*, якщо абсолютна похибка числа не перевищує ½ одиниці розряду, що відповідає цій цифрі.

Приклад 1. Нехай x=14,537 і відомо, що $\Delta(x)$=0,04. Скільки вірних значущих цифр має число x?

Розв'язання. Оскільки $\Delta(x)>0{,}5\cdot10^{-2}$ і $\Delta(x)<0{,}5\cdot10^{-1}$, то у числа x вірними будуть значущі цифри 1,4,5, а цифри 3 і 7 – сумнівні

Приклад 2. Нехай x=8,677142 і $\Delta(x)=3\cdot10^{-4}$. Скільки вірних значущих цифр має число x?

Розв'язання. Оскільки $\Delta(x)=0{,}3\cdot10^{-3}<0{,}5\cdot10^{-3}$, то x має вірні три значущі цифри після коми, тобто вірними будуть значущі цифри 8,6,7,7.

Приклад 3. Нехай x=0,046725 і $\Delta(x)$=0,008. Скільки вірних значущих цифр має число x?

Розв'язання. Маємо $\Delta(x)=0{,}0\cdot10^{-2}>0{,}5\cdot10^{-2}$. Отже у числа x всі значущі цифри сумнівні.