Харьковский национальный университет имени В.Н.Каразина

“ІНФОРМАТИКА І ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ для хіміків”

Лекция №5 “Некорректные задачи матричной алгебры“

В.В.Иванов

Кафедра химического материаловедения

$$A\vec{X} = \vec{Y} \qquad \vec{X} = A^{-1}\vec{Y}$$

Однородные $\vec{Y} = 0$

неоднородные $\vec{Y} \neq 0$

- Если число уравнений (m) , **больше** числа переменных (n) – *переопределенная* система
- Если число уравнений (m) , **меньше** числа переменных (n) – *недоопределенная* система
- Система *совместна*, если у нее есть хотя - бы одно решение. В противном случае она *несовместна*

$$A\vec{X} = \vec{Y} \qquad \vec{X} = A^{-1}\vec{Y}$$

Пример 1. Уравнение имеет вид:

$$\begin{cases} 2x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + 2x_2 = 2 \end{cases} \qquad \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \qquad \det A = 4 - 1 = 3$$

$$A^{-1} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix} \qquad \vec{X} = A^{-1}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

решение $\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

Вносим небольшое возмущение $\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} 1.1 \\ 2 \end{pmatrix}$

$$\vec{X} = A^{-1}\begin{pmatrix} 1.1 \\ 2 \end{pmatrix} = \frac{1}{3}\begin{pmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1.1 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.066666 \\ 0.966666 \end{pmatrix}$$

Решение было таким $\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ стало таким $\begin{pmatrix} 0.066666 \\ 0.966666 \end{pmatrix}$

Пример 2

$$\begin{cases} x_1 + 10x_2 = 11 \\ 10x_1 + 101x_2 = 111 \end{cases} \qquad \begin{pmatrix} 1 & 10 \\ 10 & 101 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11 \\ 111 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1} = \begin{pmatrix} 101 & -10 \\ -10 & 1 \end{pmatrix} \qquad \text{решение:} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$A^{-1}\begin{pmatrix} 11.1 \\ 111 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 101 & -10 \\ -10 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 11.1 \\ 111 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1121.1 - 1110 \\ -111 + 111 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 11.1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{было:} \boxed{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}} \qquad \text{стало:} \boxed{\begin{pmatrix} 11.1 \\ 0 \end{pmatrix}}$$

$$A^{-1}\begin{pmatrix} 11 \\ 111.1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 101 & -10 \\ -10 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 11 \\ 111.1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1111 - 1111 \\ -110 + 111.1 \end{pmatrix} = \boxed{\begin{pmatrix} 0 \\ 1.1 \end{pmatrix}}$$

Такие задачи называют **плохо обусловленными**

Число обусловленности матрицы

$$Ax = Y \qquad A^{-1}Y = x$$

$$\| A \| \cdot \| x \| \geq \| Y \| \qquad \| A^{-1} \| \cdot \| Y \| \geq \| x \|$$

Число обусловленности $\mathrm{COND}(A)$ $\mathrm{COND}(A) = \dfrac{\|A\|}{\|A^{-1}\|}$

Плохая обусловленность не свойство **X** или **Y**, а свойство матрицы !

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 10 \\ 10 & 101 \end{pmatrix} \qquad \begin{vmatrix} 1-\lambda & 10 \\ 10 & 101-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(1-\lambda)(101-\lambda) - 10\cdot 10 = 0$$

$$\lambda^2 - 102\lambda + 1 = 0$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{102 \pm \sqrt{102^2 - 4\cdot 1\cdot 1}}{2} = \frac{102 \pm 101.9804}{2} = 51 \pm 50.9902$$

$$\lambda_{\max} = 101.9902, \quad \lambda_{\min} = 0.0098$$

$$\mathrm{COND}(A) = \frac{101.9902}{0.0098} = 1.04\cdot 10^4$$

К первому примеру

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix} \qquad \begin{vmatrix} 2-\lambda & 1 \\ 1 & 2-\lambda \end{vmatrix} = 0$$

$$(2-\lambda)^2 - 1 = 0 \qquad \lambda^2 - 4\lambda + 3 = 0$$

$$\lambda_{max} = 3, \quad \lambda_{min} = 1$$

$$\mathrm{COND(A)} = 3$$

Пример 3

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{cases} x_1 + x_2 = 5 \\ x_1 + x_2 = 5 \end{cases}$$

$$\det(A) = 1 \cdot 1 - 1 \cdot 1 = 0.$$

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = 0 \qquad \lambda^2 - 2\lambda = 0 \qquad \lambda_{\max} = 2, \quad \lambda_{\min} = 0$$

$$\mathrm{COND}(A) = \frac{2}{0} = \infty$$

$$x_1 + x_2 = 5 \qquad x_2 = 5 - x_1$$

$$x_1 = \alpha \qquad x_2 = 5 - \alpha \qquad \begin{pmatrix} \alpha \\ 5-\alpha \end{pmatrix}$$

Любое решение является точным !

$$Ax - y = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \alpha \\ 5-\alpha \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha + 5 - \alpha - 5 \\ \alpha + 5 - \alpha - 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Найдем такое решение, которое соответствует минимальному x !

$$\begin{pmatrix} \alpha & 5-\alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha \\ 5-\alpha \end{pmatrix} = \alpha^2 + (5-\alpha)^2 = 2\alpha^2 - 10\alpha + 25$$

$$4\alpha - 10 = 0 \qquad \alpha = \frac{5}{2}$$

Т.е. наилучшее решение: $\frac{5}{2}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2.5 \\ 2.5 \end{pmatrix}$

Можно поступить так:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad \rightarrow \quad \widetilde{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1+\varepsilon \end{pmatrix}$$

$$\det(\widetilde{A}) = 1\cdot(1+\varepsilon) - 1\cdot 1 = \varepsilon$$

$$\widetilde{A}^{-1} = \frac{1}{\varepsilon}\begin{pmatrix} 1+\varepsilon & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$X = A^{-1} Y = \frac{1}{\varepsilon}\begin{pmatrix} 1+\varepsilon & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} = \frac{1}{\varepsilon}\begin{pmatrix} (1+\varepsilon)y_1 - y_2 \\ -y_1 + y_2 \end{pmatrix}$$

$$\begin{cases} x_1 = \dfrac{(1+\varepsilon)y_1 - y_2}{\varepsilon} \\ x_2 = \dfrac{-y_1 + y_2}{\varepsilon} \end{cases}$$

Почему это решение плохо ?

Корректность задачи $A\vec{X} = \vec{Y}$

Первая попытка определения корректности математической задачи принадлежит французскому математику Жаку Адамару (1865 -1963).

«Одна из фундаментальных проблем небесной механики - проблема устойчивости солнечной системы - попадает в категорию некорректных задач………… каждую устойчивую траекторию можно преобразовать бесконечно малым изменением начальных данных во вполне неустойчивую траекторию, уходящую на бесконечность. В астрономических задачах начальные данные известны лишь с определенной ошибкой. Но сколь ни мала эта ошибка, она может повлечь за собой полное и абсолютное возмущение в требуемом результате». 1901 год.

Корректность по Адамару $\quad A\vec{X} = \vec{Y}$

Задача может считаться **корректной** (или **корректно поставленной**) если:

•Равенство $AX_1=AX_2$ для векторов X_1 и X_2 приводит к равенству $X_1=X_2$ (условие единственности решения).

•Обратная матрица существует и однозначно определена (условие устойчивости решений)

•Решение непрерывно зависит от данных.

Все остальные задачи (некорректные) **нефизичны**.

Корректность по Тихонову

$$A\vec{X} = \vec{Y}$$

•Априорно известно что решение задачи существует и принадлежит априорно заданному множеству.

•Решение единственно.

•Бесконечно малыми вариациями правой части, не выводящим решение из заданного класса решений, соответствует бесконечно малые вариации решения.

Стандартная схема решения задачи $A\vec{X} = \vec{Y}$
- минимизация функционала ошибки:

$$A\vec{X} - \vec{Y} = \vec{R}$$

Вектор **невязки** R должен быть минимальным

$$\vec{R}\cdot\vec{R} = R^{+}\cdot R = (.....R......)\begin{pmatrix} \vdots \\ R \\ \vdots \end{pmatrix} = \| R \|$$

$$\mathbf{E(X)} = \| \mathbf{R} \| = \left\| \mathbf{AX} - \mathbf{Y} \right\| = (\mathbf{X}^{+}\mathbf{A}^{+} - \mathbf{Y}^{+})(\mathbf{AX} - \mathbf{Y})$$

$$\mathbf{E(X)} = (\mathbf{X}^{+}\mathbf{A}^{+} - \mathbf{Y}^{+})(\mathbf{AX} - \mathbf{Y}) = \mathbf{X}^{+}\mathbf{A}^{+}\mathbf{AX} - \mathbf{X}^{+}\mathbf{A}^{+}\mathrm{Y} - \mathrm{Y}^{+}\mathbf{AX}$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}^{+}}\mathrm{E(X)} = \mathrm{A^{+}AX} - \mathrm{A^{+}Y} \qquad \mathrm{A^{+}AX} - \mathrm{A^{+}Y} = 0$$

$$\mathrm{A^{+}AX} = \mathrm{A^{+}Y} \qquad \rightarrow \qquad \boxed{\mathrm{X} = (\mathrm{A^{+}A})^{-1}\mathrm{A^{+}Y}}$$

Метод Регуляризации Тихонова

По Тихонову:

$$F_\varepsilon(X) = \|AX - Y\| + \varepsilon\|X\| = (X^+A^+ - Y^+)(AX - Y) + \varepsilon X^+X$$

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{X}^+}\mathbf{F}_\varepsilon(\mathbf{X}) = \frac{\partial}{\partial \mathbf{X}^+}(\mathbf{X}^+\mathbf{A}^+\mathbf{A}\mathbf{X} - \mathbf{X}^+\mathbf{A}^+\mathbf{Y} - \mathbf{Y}^+\mathbf{A}\mathbf{X} + \mathbf{Y}^+\mathbf{Y} + \varepsilon\mathbf{X}^+\mathbf{X}) = \mathbf{0}$$

$$A^+AX - A^+Y + \varepsilon X = 0$$

$$(A^+A + \varepsilon I)X = A^+Y \longrightarrow \boxed{X = (A^+A + \varepsilon I)^{-1}A^+Y}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \qquad \left(\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} + \varepsilon \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$$

$$\left(\begin{pmatrix} 2 & 2 \\ 2 & 2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 + y_2 \\ y_1 + y_2 \end{pmatrix} \qquad \begin{pmatrix} 2+\varepsilon & 2 \\ 2 & 2+\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 + y_2 \\ y_1 + y_2 \end{pmatrix}$$

$$\det(\widetilde{A}) = (2+\varepsilon)^2 - 4 = 4\varepsilon + \varepsilon^2 = \varepsilon(\varepsilon + 4) \qquad \widetilde{A}^{-1} = \frac{1}{\varepsilon(\varepsilon+4)} \begin{pmatrix} 2+\varepsilon & -2 \\ -2 & 2+\varepsilon \end{pmatrix}$$

$$\vec{X} = \widetilde{A}^{-1} A^{+} \vec{Y} = \frac{1}{\varepsilon(\varepsilon+4)} \begin{pmatrix} 2+\varepsilon & -2 \\ -2 & 2+\varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 + y_2 \\ y_1 + y_2 \end{pmatrix}$$

$$\vec{X} = \frac{y_1 + y_2}{\varepsilon + 4} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \qquad \begin{cases} x_1 = \dfrac{y_1 + y_2}{\varepsilon + 4} \\ x_2 = \dfrac{y_1 + y_2}{\varepsilon + 4} \end{cases}$$

Зависимость решения от параметра регуляризации

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ 5 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := 0.1$$

$$\left(A^T \cdot A + \varepsilon \cdot I\right)^{-1} \cdot A^T \cdot y = \begin{pmatrix} 2.439 \\ 2.439 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := 0.01$$

$$\left(A^T \cdot A + \varepsilon \cdot I\right)^{-1} \cdot A^T \cdot y = \begin{pmatrix} 2.494 \\ 2.494 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := 0.001$$

$$\left(A^T \cdot A + \varepsilon \cdot I\right)^{-1} \cdot A^T \cdot y = \begin{pmatrix} 2.499 \\ 2.499 \end{pmatrix}$$

Вернемся к примеру № 2

-

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 10 \\ 10 & 101 \end{pmatrix} \qquad y := \begin{pmatrix} 11 \\ 111 \end{pmatrix}$$

$$x := A^{-1} \cdot y \qquad x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$y := \begin{pmatrix} 11.1 \\ 111 \end{pmatrix} \qquad x := A^{-1} \cdot y \qquad x = \begin{pmatrix} 11.1 \\ 3.553 \times 10^{-15} \end{pmatrix}$$

Регуляризация по Тихонову пример № 2

ξ - Точность экспериментальных данных, ε-регуляризирующий параметр

вар 1

$$\xi := 0.1 \qquad y := \begin{pmatrix} 11+\xi \\ 111 \end{pmatrix} \qquad I := \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := \xi \cdot 0.01$$

$$x := \left(A^T \cdot A + \varepsilon \cdot I\right)^{-1} \cdot A^T \cdot y \qquad x = \begin{pmatrix} 1.072 \\ 0.993 \end{pmatrix}$$

вар 2

$$\xi := 0.01 \qquad y := \begin{pmatrix} 11+\xi \\ 111 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := \xi \cdot 0.01$$

$$x := \left(A^T \cdot A + \varepsilon \cdot I\right)^{-1} \cdot A^T \cdot y \qquad x = \begin{pmatrix} 1.04 \\ 0.996 \end{pmatrix}$$

вар 3

$$\xi := 1 \qquad y := \begin{pmatrix} 11+\xi \\ 111 \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon := \xi \cdot 0.01$$

$$x := \left(A^T \cdot A + \varepsilon \cdot I\right)^{-1} \cdot A^T \cdot y \qquad x = \begin{pmatrix} 1.078 \\ 0.993 \end{pmatrix}$$

$$\left|AX - Y\right| \le \delta$$

.

Приведу без доказательств несколько распространенных оценок которыми можно ориентироваться при выборе ε.

$$\varepsilon \le \frac{\left\|A^{+}AA^{+}\right\|\delta}{\left\|A^{+}X(\delta)\right\| - \left\|A^{+}\right\|\delta} \qquad \varepsilon \le \frac{\left\|AA^{+}\right\|\delta}{\left\|X(\delta)\right\| - \delta} \qquad \varepsilon \le \frac{\left\|A\right\|^{2}\delta}{\left\|X(\delta)\right\| - \delta}$$

Здесь **δ** – точность экспериментальных данных

Псевдообратные матрицы, Псевдорешение

$$A^{-1}A = AA^{-1} = I. \xrightarrow{\text{обобщение}} \begin{array}{l} A^{\#}AA^{\#} = A^{\#} \\ AA^{\#}A = A \end{array}$$

$$A^{\#} = \lim_{\varepsilon \to +0}(A^{+}A + \varepsilon I)^{-1}A^{+} \qquad X = A^{\#}Y$$

Оценки точности решения матричного уравнения

$$A\vec{X} = \vec{Y}$$

$$\vec{R} = A\vec{X} - \vec{Y}$$ невязка

$$\eta = \vec{R} \cdot \vec{R} = \|AX - Y\|$$

$$\Delta = X - \widetilde{X}$$ $\widetilde{X}$ Точное решение

$$A\Delta = A(X - \widetilde{X}) = AX - A\widetilde{X} = AX - Y = R$$

$$A^{-1}A\Delta = A^{-1}(AX - Y) = A^{-1}R$$

$$\Delta = A^{-1}R$$

Связь между точностью расчета X и нормой невязки:

$$\|X - \widetilde{X}\| = \|A^{-1}\| \cdot \| R \|$$

Некоторые аспекты вычислений на ЭВМ

- Кол-во «вещественных» чисел ограничено
- Точность хранения вещественных чисел ограничена

Экспоненциальная запись (нормализованная форма записи) - представление действительных чисел в виде мантиссы и порядка. Удобна при представлении очень больших и очень малых чисел, а также для унификации их написания.

N — записываемое число; M — мантисса; n — основание показательной функции; p (целое) — порядок.

$$N = M \cdot n^p$$

Пример: $-23.04579 \cdot 10^{-8}$

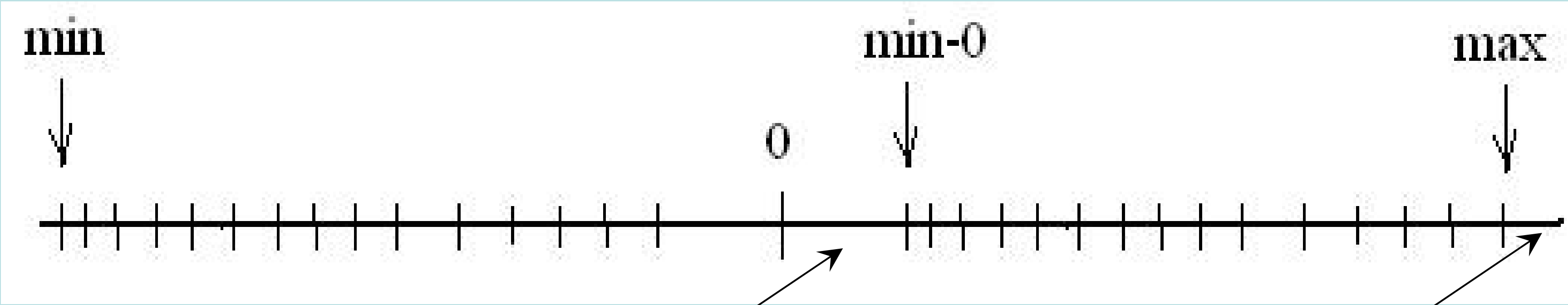
$$-\underbrace{0.2304579}_{\text{мантисса}}E-06$$

Знак числа

Знак порядка

Порядок числа

«Вещественная шкала» компьютера



Underflow
(исчезновение порядка)

Overflow
(переполнение)

Стандарт IEEE754

Одинарная точность
4 байт = 32 бита:

1	8	23
	порядок	мантисса

Двойная точность
8 байт = 64 бита:

1	11	52
	порядок	мантисса

Особая ситуация - «не число» (NaN).

Точность	Одинарная	Двойная	Расширенная
Размер (байты)	4	8	10
Число десятичных знаков	7	15	19
Наименьшее значение > 0	$1{,}2\times10^{-38}$	$2{,}3\times10^{-308}$	$3{,}4\times10^{-4932}$
Наибольшее значение	$3{,}4\times10^{+38}$	$1{,}7\times10^{+308}$	$1{,}1\times10^{+4932}$

На типичных (персональных) комп.
это дорогостоящий режим – затраты времени

Примеры “неточности” вычислений

-

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 9 \end{pmatrix}$$

$$|A| = 0$$

$$B := A^{-1}$$

$$A \cdot B = \blacksquare$$

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 8.9 \end{pmatrix} \qquad |A| = 0.3$$

$$B := A^{-1}$$

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} 1.00000000 & \underline{-3.55271368 \times 10^{-15}} & 0.00000000 \\ 0.00000000 & 1.00000000 & 0.00000000 \\ \underline{-1.42247325 \times 10^{-15}} & \underline{3.19189120 \times 10^{-15}} & 1.00000000 \end{pmatrix}$$

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 4 & 7 \\ 2 & 5 & 8 \\ 3 & 6 & 8.99999999 \end{pmatrix} \qquad |A| = 3 \times 10^{-8}$$

$$B := A^{-1}$$

$$A \cdot B = \begin{pmatrix} \underline{0.99999999} & \underline{29.80232239 \times 10^{-9}} & 0.00000000 \\ 0.00000000 & 1.00000000 & 0.00000000 \\ \underline{14.90116119 \times 10^{-9}} & \underline{-29.80232239 \times 10^{-9}} & 1.00000000 \end{pmatrix}$$

ЗНАЧАЩИЕ цифры в приближенных вычислениях – все цифры числа, начиная с первой слева, отличной от нуля, до последней, за правильность которой можно ручаться.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ТОЧНОСТЬ РЕШЕНИЯ должна быть выше (скажем на порядок !), чем ожидаемая физическая точность модели (экспериментальные данные). Более высокая математическая точность, как и более низкая (что особенно важно) неадекватны данной модели.

Четыре источника погрешности результата расчета:

- **погрешность математической модели** – связана с ее **несоответствием физической реальности**. Если математическая модель выбрана недостаточно тщательно, то, какие бы методы мы не применяли для расчета, все результаты будут недостаточно надежны, а в некоторых случаях и совершенно неправильны.

- **погрешность исходных данных**, принятых для расчета. Это неустранимая погрешность, но эту погрешность возможно и необходимо оценить для выбора алгоритма расчета и точности вычислений. Как известно, ошибки эксперимента условно делят на систематические, случайные и грубые, а идентификация таких ошибок возможна при статистическом анализа результатов эксперимента.

- **погрешность метода** – основана на дискретном характере любого численного алгоритма. Это значит, что вместо точного решения исходной задачи метод находит решение другой задачи, близкого в каком-то смысле к искомому. Погрешность метода – основная характеристика любого численного алгоритма. Погрешность метода **должна быть не меньше (желательно на порядок)** неустранимой погрешности.

- **погрешность округления** – связана с использованием в вычислительных машинах чисел с конечной точностью представления.

Пример

$$1 + 10^{20} - 10^{20} = ?$$

$$(1+10^{20}) - 10^{20} = 10^{20} - 10^{20} = 0$$

$$1+10^{20} = 0.00000000000000000001 \cdot 10^{20} + 1 \cdot 10^{20}$$

$$= (0.\underbrace{0000000}000000000000 1+1) \cdot 10^{20}$$

В регистре с одинарной точностью умещается 7 десятичных цифр !

$$1+ (10^{20} - 10^{20}) = 1 + 0 = 1$$

Пример

$$e^{x} = 1 + x + x^{2}/2 + x^{3}/3! + \ldots$$

$$e^{-5.5} = 1.0000 - 5.5000 + 15.125 - 27.730 + 39.129 - \ldots..$$

$$= \underline{+0.0026363}$$

Точное значение = $\underline{+0.00408677}$

$$e^{-5.5} = 1/e^{5.5} = 1/(1 + 5.5 + 15.125 + 27.730\ldots..)$$

$$= +0.0040865$$

Пример

$$E_n = \int_0^1 x^n e^{x-1} dx, \quad n = 1,2,3,\ldots$$

$$E_n = 1 - nE_{n-1} \qquad E_1 = 1/e, \qquad n = 1,2,3,\ldots$$

$$E_1 = 0.367879$$

$$E_2 = 0.264242$$

$$\ldots\ldots\ldots$$

$$E_9 = \underline{-0.0684800}$$

$$E_{n-1} = (1 - E_n)/n \qquad E_9 = 0.0916123$$

Математик делает всё, что можно и так, как нужно.

Физик делает всё, что нужно и так, как можно.

Инженер делает всё, что нужно и так, чтобы оно работало.

(и химик)

Не помню кто сказал !!!

Литература

1. *Беклемишев Д. В.* Дополнительные главы линейной алгебры. — М.: Наука, 1983. — 335 с.
2. *Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Моулер* «Машинные методы математических вычислений», М. Мир.1980
3. *И. Бабушка, Э. Витасек, М. Прагер*, «Численные процессы решения дифференциальных уравнений», М. Мир. 1969

Контрольная 2

Для линейной регрессии вида: $y = a + x$

Получите формулу для коэффициента **а**

Рассчитайте величину **а** для данных:

x	**y**
1	1
1.2	2
1.4	3.5
2.7	4

Вычислите величины **у** по уравнению регрессии.
Вычислите дисперсию **у**