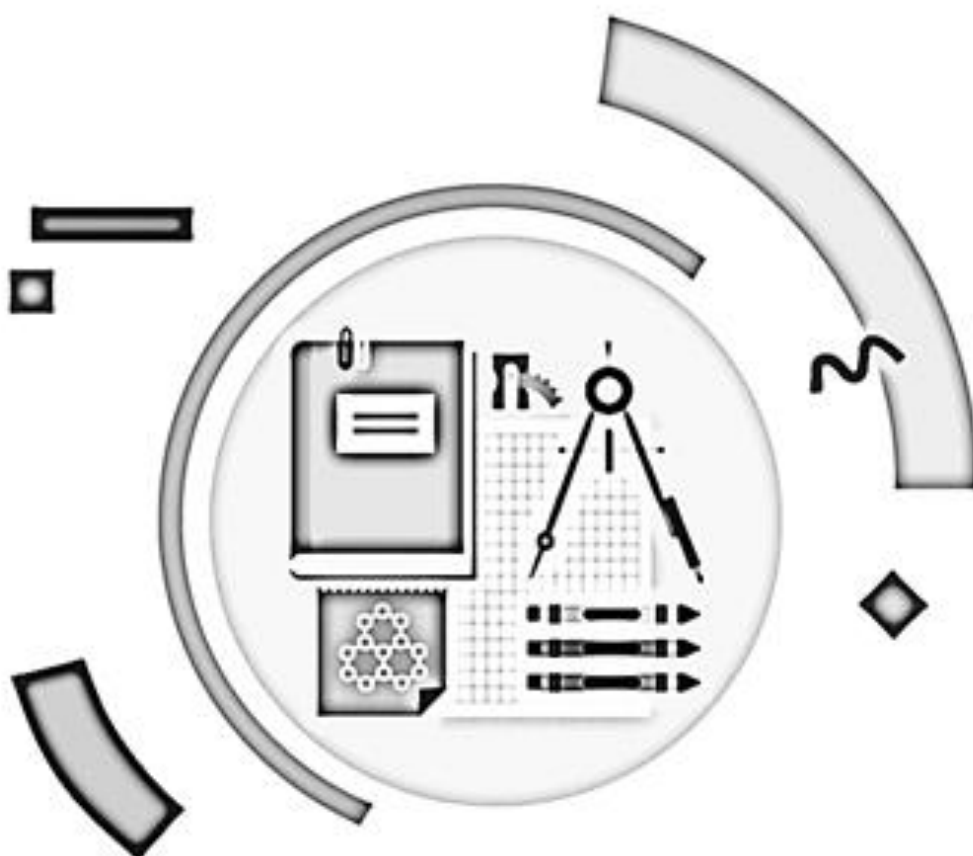


И.Л. Фаустова

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Учебное пособие



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»
Северский технологический институт – филиал НИЯУ МИФИ
(СТИ НИЯУ МИФИ)

И.Л. Фаустова

Численные методы

Учебное пособие

Северск 2013

УДК 517.
ББК _____
Ф 517

Фаустова И.Л.

Ф 517 Численные методы: учебное пособие. – Северск: Изд. СТИ НИЯУ МИФИ, 2013. – 40 с.

В данном учебном пособии рассмотрены следующие вопросы: элементы теории погрешностей, интерполирование и аппроксимация функций, в том числе метод наименьших квадратов, численное решение систем линейных алгебраических уравнений, приближенное решение нелинейных и трансцендентных уравнений, в частности методами половинного деления (дихотомии), хорд и касательных, а так же численное интегрирование с помощью формул прямоугольников, трапеций и формулы Симпсона, решение обыкновенных дифференциальных уравнений.

Пособие предназначено для студентов второго курса СТИ НИЯУ МИФИ очной формы обучения по специальности 240501 – «Химическая технология материалов современной энергетики».

Пособие одобрено на заседании кафедры высшей математики и информационных технологий (протокол № 3 от " 13 " марта 2013 г.).

Рекомендовано к печати Редакционно-издательским Советом СТИ НИЯУ МИФИ

Рег.№ 7/13 от «9» апреля 2013г.

Рецензенты

канд. физ.–мат. наук, доцент кафедры ВМ НИ ТПУ Е.Г. Пахомова

канд. физ.–мат. наук, доцент кафедры ВМ НИ ТПУ Е.И. Подберезина

Содержание

	Введение	4
1	Элементы теории погрешностей	5
2	Интерполирование и аппроксимация функций	7
	2.1 Интерполирование алгебраическими многочленами.....	7
	2.2 Интерполяционная формула Ньютона.....	9
	2.3 Метод наименьших квадратов (МНК)	10
3	Численное решение систем линейных алгебраических уравнений.....	15
	3.1 Метод Гаусса	17
	3.2 Схема Гаусса с выбором главного элемента	21
4	Приближенное решение нелинейных и трансцендентных уравнений.....	23
	4.1 Графическое решение уравнений.....	23
	4.2 Метод половинного деления (дихотомии)	24
	4.3 Метод хорд.....	24
	4.4 Метод Ньютона (метод касательных).....	26
5	Численное интегрирование	28
	5.1 Формула прямоугольников	29
	5.2 Формула трапеций	30
	5.3 Формула Симпсона	31
6	Решение обыкновенных дифференциальных уравнений	33
	6.1 Метод рядов, не требующий вычисления производных правой части уравнения.....	35
	6.2 Метод Рунге-Кутты.....	36
	6.3 Многошаговые методы.....	39
7	Рекомендуемая литература.....	40

Введение

В связи с развитием новой вычислительной техники инженерная практика наших дней все чаще встречается с математическими задачами, точное решение которых получить весьма сложно или невозможно. В этих случаях обычно прибегают к тем или иным приближенным вычислениям. Поэтому приближенные и численные методы получили за последние годы широкое развитие и приобрели исключительно важное значение. Новые вычислительные средства вызвали переоценку известных методов решения задач с точки зрения целесообразности их реализации на компьютере и стимулировали создание более эффективных.

Предметом изучения вычислительной математики являются методы построения и исследования численных методов решения математических задач, которые моделируют различные процессы. Некоторые прикладные задачи формируются, исходя из определенного физического смысла процесса (распределение тепла в стержне, описание траектории движения объектов и т.д.), некоторые – из описания экономической модели (задача распределения ресурсов, задача планирования производства, транспортная задача перевозки грузов, оптимальных в заданном смысле) и т.д. Для постановки любой прикладной задачи нужна математическая модель. Можно выделить следующие этапы решения прикладных задач с использованием компьютера: постановка задачи и построение математической модели, разработка алгоритма, запись алгоритма на языке программирования, выполнение программы на компьютере, анализ полученных результатов.

Численные методы в большинстве случаев сами по себе являются приближенными, т.е. даже при отсутствии погрешностей во входных данных и при идеальном выполнении арифметических действий они дают решение задачи с некоторой погрешностью. Исследованию погрешности численных методов уделяется значительное внимание. Для решения одной и той же задачи могут применяться различные приближенные методы. Знание вычислительной математики необходимо всем, кто собирается проводить численное моделирование, независимо от специальности исследователя. Даже при использовании готовых пакетов программ незнание численных методов может существенно снизить значимость полученных результатов, а в ряде случаев привести к неправильным результатам или неправильной интерпретации результатов.

В данном учебном пособии рассматриваются: элементы теории погрешностей, интерполирование и аппроксимация функций, численное решение систем линейных алгебраических уравнений, приближенное решение нелинейных и трансцендентных уравнений, численное интегрирование, решение обыкновенных дифференциальных уравнений.

1 Элементы теории погрешностей

Численное решение любой задачи, как правило, осуществляется приближенно, с различной точностью. Это может быть обусловлено неточностью исходных данных, конечной разрядностью вычислений (вручную или на компьютере) и т. п.

Главная задача численных методов – фактическое нахождение решения с требуемой или, по крайней мере, оцениваемой точностью.

Отклонение истинного решения от приближенного называется погрешностью. Полная погрешность вычислений состоит из двух составляющих: 1) неустраняемая погрешность; 2) устранимая погрешность.

Неустраняемая погрешность обусловлена неточностью исходных данных и никаким образом не может быть уменьшена в процессе вычислений.

Устранимая погрешность состоит из двух составляющих: а) погрешность аппроксимации (метода); б) погрешность вычислений. Эти составляющие могут быть уменьшены выбором более точных методов и увеличением разрядности вычислений.

В дальнейшем нас будут интересовать корректно поставленные задачи вычисления.

Задача вычисления $y = A(x)$ называется корректно поставленной, если для любых входных данных из некоторого класса решение задачи существует, единственно и устойчиво по входным данным (т. е. непрерывно зависит от входных данных задачи).

В сформулированном понятии **корректности** учтены достаточно естественные требования, т. к. чтобы численно решать задачу, нужно быть уверенным, что ее решение **существует**. Столь же естественны требования **единственности** и **устойчивости** решения.

Рассмотрим подробнее понятие **устойчивости**. Обычно нас интересует решение y , соответствующее входным данным x . Реально мы имеем возмущенные входные данные с погрешностью δx , т.е. $x + \delta x$, и находим возмущенное решение:

$$y + \delta y = A(x + \delta x).$$

Эта погрешность входных данных порождает **неустраняемую** погрешность решения:

$$\delta y = A(x + \delta x) - A(x).$$

Если решение непрерывно зависит от входных данных, то $\|\delta y\| \rightarrow 0$ всегда при $\|\delta x\| \rightarrow 0$, и задача устойчива по входным данным. Здесь символ $\|\ \|$ - норма.

Если X – точное значение величины, а X^* – приближенное значение, то **абсолютная погрешность** приближения определяется выражением $\Delta = |X^* - X|$.

Относительной погрешностью величины называется отношение абсолютной погрешности к модулю ее точного значения: $\delta = \Delta / |X|$.

Достаточно часто точное значение величины неизвестно, поэтому указывают границы погрешности:

$$\begin{aligned} X^* - \Delta &\leq X \leq X^* + \Delta; \\ X^* (1 - \delta) &\leq X \leq X^* (1 + \delta). \end{aligned}$$

Рассмотрим пример, в котором порядок выполнения операций существенно влияет на погрешность результата.

Пример – Необходимо отыскать минимальный корень уравнения. Вычисления производим в десятичной системе счисления, причем в числе после округления оставляем четыре действующие цифры (разряда):

$$\begin{aligned} x^2 - 140x + 1 &= 0; \\ x &= 70 - \sqrt{4899}; \\ \sqrt{4899} &= 69.992 \approx 69.99; \\ x &= 70 - 69.99 = 0.01. \end{aligned}$$

Рассмотрим другой алгоритм вычисления корня, для чего избавимся от иррациональности в числителе:

$$\begin{aligned} x &= 1/(70 + \sqrt{4899}); \\ 70 + 69.99 &\approx 140.0; \\ x &= 1/140 = 0.00714285 \approx 0.007143. \end{aligned}$$

Как видно из сравнения полученных результатов, применение "неудачного" алгоритма завышает результат на 30 %. Это явление в прикладной математике (в практике вычислений) называется **потерей значащих цифр**, и часто наблюдается при вычитании близких величин. Потеря значащих цифр, например, довольно часто приводит к существенному искажению результатов при решении даже сравнительно небольших систем линейных алгебраических уравнений.

2 Интерполирование и аппроксимация функций

Задача интерполирования состоит в том, чтобы по значениям функции $f(x)$ в нескольких точках отрезка восстановить ее значения в остальных точках данного отрезка. Разумеется, такая постановка задачи допускает сколь угодно много решений.

Задача интерполирования возникает, например, в том случае, когда известны результаты измерений $y_k = f(x_k)$ некоторой физической величины $f(x)$ в точках $x_k, k = 0, 1, \dots, n$ и требуется определить ее значение в других точках. Интерполирование используется также при необходимости сгущения таблиц, когда вычисление значений $f(x)$ по точным формулам трудно.

Иногда возникает необходимость *приближенной замены (аппроксимации)* данной функции (обычно заданной таблицей) другими функциями, которые легче вычислить. При обработке эмпирических (экспериментальных) зависимостей, результаты обычно представлены в табличном или графическом виде. Задача заключается в аналитическом представлении искомой функциональной зависимости, то есть в подборе формулы, корректно описывающей экспериментальные данные.

2.1 Интерполирование алгебраическими многочленами

Пусть функциональная зависимость задана таблицей

$$y_0 = f(x_0); \dots, y_1 = f(x_1); \dots, y_n = f(x_n).$$

Обычно задача интерполирования формулируется так: найти многочлен $P(x) = P_n(x)$ степени не выше n , значения которого в точках x_i ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) совпадают со значениями данной функции, то есть

$$P(x_i) = y_i.$$

Геометрически это означает, что нужно найти алгебраическую кривую вида

$$y = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n, \quad (2.1)$$

проходящую через заданную систему точек $M_i(x_i, y_i)$, показанную на рисунке 2.1. Многочлен $P(x)$ называется **интерполяционным многочленом**. Точки x_i ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) называются **узлами интерполяции**.

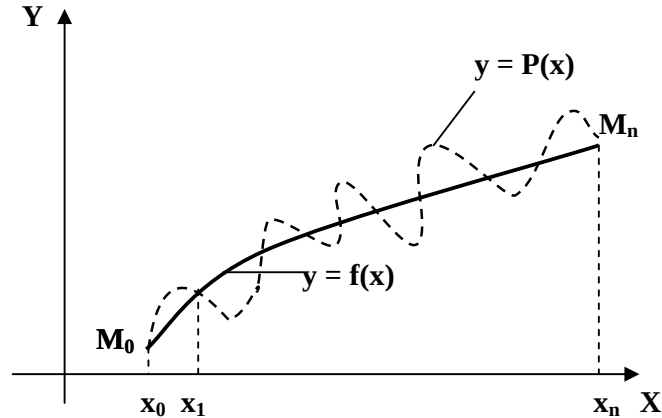


Рисунок 2.1 – Интерполирование алгебраическим многочленом

Для любой непрерывной функции $f(x)$ сформулированная задача имеет единственное решение. Действительно, для отыскания коэффициентов $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ получаем систему линейных уравнений

$$a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 + \dots + a_n x_i^n = f(x_i)_{i=0, n}, \quad (2.2)$$

определитель которой (определитель Вандермонда) отличен от нуля, если среди точек x_i ($i = 0, 1, 2, \dots, n$) нет совпадающих.

Решение системы (2.2) можно записать различным образом. Однако наиболее употребительна запись интерполяционного многочлена в форме Лагранжа и в форме Ньютона.

Запишем без вывода **интерполяционный многочлен Лагранжа**:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{\prod_{j \neq k} (x - x_j)}{\prod_{j \neq k} (x_k - x_j)} f(x_k). \quad (2.3)$$

Нетрудно заметить, что старшая степень аргумента x в многочлене Лагранжа равна n . Кроме этого, можно показать, что в узловых точках значения интерполяционного многочлена Лагранжа соответствуют заданным значениям $f(x_i)$.

2.2 Интерполяционная формула Ньютона

Интерполяционная формула Ньютона позволяет выразить интерполяционный многочлен $P_n(x)$ через значение $f(x)$ в одном из узлов и через разделенные разности функции $f(x)$, построенные по узлам $x_0, x_1, \dots, x_n$. Эта формула является разностным аналогом формулы Тейлора:

$$f(x) = f(x_0) + (x - x_0)f'(x_0) + \frac{(x - x_0)^2}{2!} f''(x_0) + \Lambda. \quad (2.4)$$

Прежде чем приводить формулу Ньютона, рассмотрим сведения о разделенных разностях.

Пусть в узлах $x_k \in [a, b]$, $k = 0, 1, \dots, n$ известны значения функции $f(x)$. Предполагаем, что среди точек x_k , $k = 0, 1, \dots, n$ нет совпадающих. Тогда разделенными разностями первого порядка называются отношения

$$f(x_i, x_j) = \frac{f(x_j) - f(x_i)}{x_j - x_i}, \quad i, j = 0, 1, \dots, n; \quad i \neq j. \quad (2.5)$$

Будем рассматривать разделенные разности, составленные по соседним узлам, то есть выражения

$$f(x_0, x_1), \quad f(x_1, x_2), \Lambda, \quad f(x_{n-1}, x_n).$$

По этим разделенным разностям первого порядка можно построить разделенные разности второго порядка:

$$\begin{aligned} f(x_0, x_1, x_2) &= \frac{f(x_1, x_2) - f(x_0, x_1)}{x_2 - x_0}; \\ f(x_1, x_2, x_3) &= \frac{f(x_2, x_3) - f(x_1, x_2)}{x_3 - x_1}; \\ \Lambda \\ f(x_{n-2}, x_{n-1}, x_n) &= \frac{f(x_{n-1}, x_n) - f(x_{n-2}, x_{n-1})}{x_n - x_{n-2}}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Аналогично определяются разности более высокого порядка. То есть пусть известны разделенные разности k -го порядка

$$f(x_j, x_{j+1}, \Lambda, x_{j+k}), \quad f(x_{j+1}, x_{j+2}, \Lambda, x_{j+k+1}),$$

тогда разделенная разность $k+1$ -го порядка определяется как

$$\begin{aligned} f(x_j, x_{j+1}, \Lambda, x_{j+k+1}) &= \\ &= \frac{f(x_{j+1}, x_{j+2}, \Lambda, x_{j+k+1}) - f(x_j, x_{j+1}, \Lambda, x_{j+k})}{x_{j+k+1} - x_j}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Интерполяционным многочленом Ньютона называется многочлен

$$P_n(x) = f(x_0) + (x - x_0)f(x_0, x_1) + (x - x_0)(x - x_1)f(x_0, x_1, x_2) + \dots + (x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{n-1})f(x_0, x_1, \dots, x_n). \quad (2.8)$$

Показано, что интерполяционный многочлен Лагранжа (2.3) совпадает с интерполяционным многочленом Ньютона (2.8).

2.3 Метод наименьших квадратов (МНК)

При эмпирическом (экспериментальном) изучении функциональной зависимости одной величины y от другой x производят ряд измерений величины y при различных значениях величины x . Полученные результаты можно представить в виде таблицы, графика:

X	x_1	x_2	...	x_n
Y	y_1	y_2	...	y_n

Задача заключается в аналитическом представлении искомой функциональной зависимости, то есть в подборе функции, описывающей результаты эксперимента.

Особенность задачи состоит в том, что наличие случайных ошибок измерений делает неразумным подбор такой формулы, которая точно описывала бы все опытные значения, то есть график искомой функции не должен проходить через все экспериментальные точки. Эмпирическую формулу обычно выбирают из формул определенного типа:

$$y = ax + b; \quad y = ae^{bx} + c; \quad y = a + h \sin(\omega x + \varphi).$$

Таким образом, задача сводится к определению параметров $a, b, c, \dots$ формулы, в то время как вид формулы известен заранее из каких-либо теоретических соображений или из соображения простоты аналитического представления эмпирического материала. Пусть выбранная эмпирическая зависимость имеет вид

$$y = f(x, a_0, a_1, \dots, a_n)$$

с явным указанием всех параметров, подлежащих определению. Эти параметры $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ нельзя определить точно по эмпирическим значениям функции $y_0, y_1, y_2, \dots, y_k$, так как последние содержат случайные ошибки.

Таким образом, речь может идти только о получении достаточно хороших оценок искомых параметров. *Метод наименьших квадратов* (МНК) позволяет получить несмещенные и состоятельные оценки всех параметров $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$.

Пусть все измерения значений функции $y_0, y_1, y_2, \dots, y_n$ произведены с одинаковой точностью. Тогда оценка параметров $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ определяется из условия минимума суммы квадратов отклонений измеренных значений y_k от расчетных $f(x_k; a_0, a_1, a_2, \dots, a_n)$:

$$S = \sum_{N=1}^k [y_N - f(x_N; a_0, a_1, \Lambda, a_n)]^2. \quad (2.9)$$

Отыскание же значений параметров $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$, которые доставляют **min** значение функции

$$S = S(a_0, a_1, \Lambda, a_n), \quad (2.10)$$

сводится к решению системы уравнений

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0; \quad \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0; \Lambda; \quad \frac{\partial S}{\partial a_n} = 0. \quad (2.11)$$

Наиболее распространен способ выбора функции $f(x_k; a_0, a_1, a_2, \dots, a_n)$ в виде линейной комбинации:

$$f = a_0 \varphi_0 + a_1 \varphi_1 + \Lambda + a_n \varphi_n. \quad (2.12)$$

Здесь $\varphi_0, \varphi_1, \Lambda, \varphi_n$ – базисные функции (известные); $n \ll k$; $a_0, a_1, a_2, \dots, a_n$ – коэффициенты, определяемые методом наименьших квадратов. Запишем в явном виде условие (2.11), учитывая выражение (2.12):

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial a_0} &= 2 \sum_{i=0}^k [a_0 \varphi_0(x_i) + a_1 \varphi_1(x_i) + \Lambda + a_n \varphi_n(x_i) - y_i] \varphi_0(x_i) = 0; \\ \frac{\partial S}{\partial a_1} &= 2 \sum_{i=0}^k [a_0 \varphi_0(x_i) + a_1 \varphi_1(x_i) + \Lambda + a_n \varphi_n(x_i) - y_i] \varphi_1(x_i) = 0; \\ &\Lambda \\ \frac{\partial S}{\partial a_n} &= 2 \sum_{i=0}^k [a_0 \varphi_0(x_i) + a_1 \varphi_1(x_i) + \Lambda + a_n \varphi_n(x_i) - y_i] \varphi_n(x_i) = 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Из системы линейных уравнений (2.13) определяются все коэффициенты a_k . Система (2.13) называется системой нормальных уравнений, матрица которой имеет вид

$$\begin{vmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_0, \varphi_1) & \Lambda & (\varphi_0, \varphi_n) \\ (\varphi_0, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_1) & \Lambda & (\varphi_1, \varphi_n) \\ \Lambda & \Lambda & \Lambda & \Lambda \\ (\varphi_0, \varphi_n) & (\varphi_1, \varphi_n) & \Lambda & (\varphi_n, \varphi_n) \end{vmatrix}. \quad (2.14)$$

Здесь

$$(\varphi_j, \varphi_k) = \sum_{i=0}^k \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i). \quad (2.15)$$

Матрица (2.14) называется матрицей Грама. Расширенную матрицу получим добавлением справа столбца свободных членов:

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, Y) \\ (\varphi_1, Y) \\ \Lambda \\ (\varphi_n, Y) \end{pmatrix}, \quad (2.16),$$

где
$$(\varphi_j, Y) = \sum_{i=0}^k \varphi_j(x_i) Y_i. \quad (2.17)$$

В качестве базисных функций $\varphi_0, \varphi_1, \Lambda, \varphi_n$ можно выбрать линейно независимые степенные функции

$$\varphi_0(x) = x^0 = 1; \quad \varphi_1(x) = x^1 = x; \quad \Lambda; \quad \varphi_n(x) = x^n. \quad (2.18)$$

Следует учесть, что $n \ll k$. Тогда для этих функций расширенная матрица Грама примет вид

$$\begin{bmatrix} k+1 & \sum_{i=0}^k x_i & \sum_{i=0}^k x_i^2 & \dots & \sum_{i=0}^k x_i^n & \sum_{i=0}^k y_i \\ \sum_{i=0}^k x_i & \sum_{i=0}^k x_i^2 & \sum_{i=0}^k x_i^3 & \dots & \sum_{i=0}^k x_i^{n+1} & \sum_{i=0}^k x_i y_i \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \sum_{i=0}^k x_i^n & \sum_{i=0}^k x_i^{n+1} & & & \sum_{i=0}^k x_i^{2n} & \sum_{i=0}^k x_i^n y_i \end{bmatrix}. \quad (2.19)$$

Если выбрать $n = k$, то на основании единственности интерполяционного полинома получим функцию $\varphi(x)$, совпадающую с каноническим интерполяционным полиномом степени k . При этом аппроксимирующая кривая пройдет через все экспериментальные точки, и функция S будет равна нулю.

Пример – Исходная функция $y = f(x)$ задана в виде таблице 2.1.

Таблица 2.1 – Входные данные

x	10	15	17	20
y	3	7	11	17

Аппроксимировать экспериментальные данные линейной либо квадратичной функцией. Методом наименьших квадратов необходимо уточнить коэффициенты аппроксимирующего полинома.

Решение

1 При линейной аппроксимации исходную зависимость представим в виде $f = a_0 \cdot \varphi_0 + a_1 \cdot \varphi_1$, где $\varphi_0 = x^0 = 1$; $\varphi_1 = x^1 = x$. Методом наименьших квадратов определим a_0 и a_1 . Расширенная матрица Грама в нашем случае имеет вид

$$\begin{bmatrix} 4 & 62 & 38 \\ 62 & 1014 & 662 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 15.5 & 9.5 \\ 0 & 53 & 73 \end{bmatrix}; \quad a_1 = 1.3774; \quad a_0 = -11.8491.$$

Таким образом, аппроксимирующая функция равна

$$f = -11.8491 + 1.3774x.$$

Оценим погрешность формулы, и результаты этой оценки сведем в таблицу. 2.2.

Таблица 2.2 – Результаты

x	y	f	y - f	 y-f / y
10	3	1.9249	1.0751	0.3584
15	7	8.8119	-1.8119	0.2588
17	11	11.5667	-0.5667	0.0515
20	17	15.6989	1.3011	0.07654

Для нашей линейной функции $S_1 = 6.4528$.

2 Решим ту же задачу, аппроксимировав эмпирические данные полиномом второй степени: $f = a_0 + a_1x + a_2x^2$.

Матрица Грама в этом случае имеет вид

$$\begin{bmatrix} 4 & 62 & 1014 & 38 \\ 62 & 1014 & 17288 & 662 \\ 1014 & 17288 & 304146 & 11854 \end{bmatrix} \Rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 15.5 & 253.5 & 9.5 \\ 0 & 53 & 1571 & 73 \\ 0 & 1571 & 47097 & 2221 \end{bmatrix} \Rightarrow$$

$$\begin{bmatrix} 1 & 15.5 & 253.5 & 9.5 \\ 0 & 1 & 29.6415 & 1.3774 \\ 0 & 530.2035 & 57.1046 \end{bmatrix};$$

$$a_2 = 0.1077; \quad a_1 = -1.8151; \quad a_0 = 10.3321.$$

Все результаты сведены в таблице 2.3.

Таблица 2.3 – Результаты

x	y	f	y – f	y-f / y
10	3	2.9511	0.0489	0.0163
15	7	7.3381	-0.3381	0.0483
17	11	10.6007	0.3993	0.0363
20	17	17.1101	-0.1101	0.0065

В этом случае $S_2 = 0.2883$.

Таким образом, аппроксимировав эмпирические результаты более простой функцией (линейной), мы получили погрешность в различных узловых точках, лежащую в пределах от 5 до 35 %. Более сложная формула квадратичной интерполяции обеспечивает погрешность не более 5 %. Косвенную оценку погрешности можно провести, сравнив значения S_1 и S_2 .

3 Численное решение систем линейных алгебраических уравнений

Линейные системы имеют в вычислениях очень большое значение, так как к ним может быть приведено приближенное решение широкого круга задач. Так, основными источниками возникновения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) являются теория электрических цепей, уравнения балансов и сохранения в механике, гидравлике и т.п.

Пусть дана система n линейных алгебраических уравнений с n неизвестными:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2, \\ \dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n. \end{cases} \quad (3.1)$$

Или в матричной форме:

$$A \cdot x = b; \quad (3.2)$$

где

$$A = \{a_{ij}\} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix} - \quad (3.3)$$

- матрица коэффициентов системы (3.1);

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} - \text{вектор неизвестных}; \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \dots \\ b_n \end{bmatrix} - \text{вектор свободных членов.}$$

Если матрица A невырожденная, то есть

$$\det A = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix} = \Delta \neq 0, \quad (3.4)$$

то система (3.1) или эквивалентное ей матричное уравнение (3.2) имеют единственное решение. Действительно, при условии, что $\det A \neq 0$, существует обратная матрица A^{-1} . Умножая обе части уравнения (3.2) слева на A^{-1} , получим:

$$A^{-1} \cdot A \cdot x = A^{-1} \cdot b; \Rightarrow x = A^{-1} \cdot b. \quad (3.5)$$

Формула (3.5) даёт решение уравнения (3.2), причём единственное.

Пример 1 – Решить систему уравнений матричным методом.

$$\begin{cases} 3x_1 - x_2 = 5 \\ -2x_1 + x_2 + x_3 = 0; \\ 2x_1 - x_2 + 4x_3 = 15 \end{cases} \quad A = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -2 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 4 \end{bmatrix}.$$

$$\Delta = \begin{vmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -2 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 4 \end{vmatrix} = [12 + (-2) + 0] - [(0 \cdot 1 \cdot 2) + 8 - 3] = 5.$$

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 4/5 & -1/5 \\ 2 & 12/5 & -3/5 \\ 0 & 1/5 & 1/5 \end{bmatrix}; \quad x = \begin{bmatrix} 1 & 4/5 & -1/5 \\ 2 & 12/5 & -3/5 \\ 0 & 1/5 & 1/5 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \\ 15 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

Для матрицы A порядка $n > 4$ непосредственное нахождение обратной матрицы A^{-1} требует много времени (операций). Поэтому формула (3.5) на практике употребляется достаточно редко.

Обычно значения неизвестных x_i ($i = 1, 2, \dots, n$) могут быть получены по известным формулам Крамера:

$$x_i = \det A_i / \det A. \quad (3.6)$$

Здесь матрица A_i получается из матрицы A заменой её i -го столбца столбцом свободных членов.

Пример 2 – Решить систему уравнений по формулам Крамера:

$$\Delta_1 = \begin{vmatrix} 5 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \\ 15 & -1 & 4 \end{vmatrix} = 20 - 15 + 5 = 10; \quad x_1 = 2.$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 3 & 5 & 0 \\ -2 & 0 & 1 \\ 2 & 15 & 4 \end{vmatrix} = 10 - 45 + 40 = 5; \quad x_2 = 1.$$

$$\Delta_3 = \begin{vmatrix} 3 & -1 & 5 \\ -2 & 1 & 0 \\ 2 & -1 & 15 \end{vmatrix} = 45 + 10 - 10 - 30 = 15; \quad x_3 = 3.$$

Применяемые в настоящее время методы решения СЛАУ можно разбить на две группы: **точные и приближённые**.

Точными методами называются такие методы, которые в предположении, что вычисления ведутся точно (без округлений), за конечное число действий позволяют получить точные значения неизвестных x_i .

Приближенными методами называются такие методы, которые даже в предположении, что вычисления ведутся без округлений, позволяют получить решение системы $(x_1, x_2, \dots, x_n)$ лишь с заданной точностью. Точное решение СЛАУ в этих случаях может быть получено теоретически как результат бесконечного процесса.

К приближенным методам относятся метод простой итерации, метод Зейделя и т.п.

3.1 Метод Гаусса

Наиболее распространенным методом решения СЛАУ является метод Гаусса, в основе которого лежит идея последовательного исключения неизвестных.

Метод Гаусса относится к точным методам решения СЛАУ. Методы Гаусса (или методы исключения неизвестных) оптимальны для решения СЛАУ общего вида по количеству арифметических операций, необходимых для нахождения решения этой системы. Существуют различные схемы, реализующие данный метод. Рассмотрим одну из них – *схему единственного деления*.

Для простоты ограничимся рассмотрением СЛАУ с четырьмя неизвестными:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + a_{14}x_4 = a_{15}, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 + a_{24}x_4 = a_{25}, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 + a_{34}x_4 = a_{35}, \\ a_{41}x_1 + a_{42}x_2 + a_{43}x_3 + a_{44}x_4 = a_{45}. \end{cases} \quad (3.7)$$

Пусть $a_{11} \neq 0$ (ведущий элемент). Разделив первое уравнение на a_{11} , получим *первую главную строку*:

$$x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3 + b_{14}x_4 = b_{15}, \quad (3.8)$$

где $b_{1j} = a_{1j} / a_{11}; \quad (j = 2, 3, 4, 5).$

Используя уравнение (3.8), можно исключить неизвестные x_1 из 2, 3 и 4-го уравнений системы (3.7). Для этого последовательно умножим уравнение (3.8) на $a_{21}; a_{31}; a_{41}$ и вычитаем результат из 2, 3 и 4-го уравнений системы (3.7) соответственно.

В результате получим систему из трех уравнений:

$$\begin{cases} a_{22}^{(1)}x_2 + a_{23}^{(1)}x_3 + a_{24}^{(1)}x_4 = a_{25}^{(1)}, \\ a_{32}^{(1)}x_2 + a_{33}^{(1)}x_3 + a_{34}^{(1)}x_4 = a_{35}^{(1)}, \\ a_{42}^{(1)}x_2 + a_{43}^{(1)}x_3 + a_{44}^{(1)}x_4 = a_{45}^{(1)}, \end{cases} \quad (3.9)$$

где коэффициенты $a_{ij}^{(1)}$ вычисляются по формуле

$$a_{ij}^{(1)} = a_{ij} - a_{i1}b_{1j} \quad (i = 2, 3, 4; j = 2, 3, 4, 5). \quad (3.10)$$

Далее первое уравнение системы (3.9) разделим на *ведущий элемент* $a_{22}^{(1)} \neq 0$ и получим

$$x_2 + b_{23}^{(1)}x_3 + b_{24}^{(1)}x_4 = b_{25}^{(1)}, \quad (3.11)$$

где $b_{2j}^{(1)} = a_{2j}^{(1)} / a_{22}^{(1)}, \quad (j = 3, 4, 5).$

Аналогично предыдущему шагу, исключая x_2 , как и x_1 , получим систему

$$\begin{cases} a_{33}^{(2)} x_3 + a_{34}^{(2)} x_4 = a_{35}^{(2)}, \\ a_{43}^{(2)} x_3 + a_{44}^{(2)} x_4 = a_{45}^{(2)}. \end{cases} \quad (3.12)$$

Здесь $a_{ij}^{(2)} = a_{ij}^{(1)} - a_{i2}^{(1)} b_{2j}^{(1)} \quad (i = 3, 4; j = 3, 4, 5).$

Разделив первое уравнение системы (3.12) на $a_{33}^{(2)} \neq 0$, получим:

$$x_3 + b_{34}^{(2)} x_4 = b_{35}^{(2)}, \quad (3.13)$$

где $b_{3j}^{(2)} = a_{3j}^{(2)} / a_{33}^{(2)} \quad (j = 4, 5).$

Теперь с помощью уравнения (3.13) исключим x_3 из второго уравнения системы (3.12), окончательно получим:

$$a_{44}^{(3)} x_4 = a_{45}^{(3)}, \quad (3.14)$$

где $a_{4j}^{(3)} = a_{4j}^{(2)} - a_{43}^{(2)} b_{3j}^{(2)} \quad (j=4, 5).$

Таким образом, исходную систему (3.7) приведем к составленной из *главных строк* (3.8), (3.11), (3.13) и (3.14) эквивалентной системе с треугольной матрицей(3.15):

$$\begin{cases} x_1 + b_{12} x_2 + b_{13} x_3 + b_{14} x_4 = b_{15}, \\ x_2 + b_{23}^{(1)} x_3 + b_{24}^{(1)} x_4 = b_{25}^{(1)}, \\ x_3 + b_{34}^{(2)} x_4 = b_{35}^{(2)}, \\ a_{44}^{(3)} x_4 = a_{45}^{(3)}. \end{cases} \quad (3.15)$$

Из системы (3.15) последовательно найдем

$$\begin{cases} x_4 = a_{45}^{(3)} / a_{44}^{(3)}, \\ x_3 = b_{35}^{(2)} - b_{34}^{(2)} x_4, \\ x_2 = b_{25}^{(1)} - b_{23}^{(1)} x_3 - b_{24}^{(1)} x_4, \\ x_1 = b_{15} - b_{12} x_2 - b_{13} x_3 - b_{14} x_4. \end{cases} \quad (3.16)$$

Итак, решение СЛАУ (3.7) распадается на два этапа:

- прямой ход (приведение системы (3.7) к треугольному виду (3.15));
- обратный ход (определение неизвестных по формуле (3.16)).

Пример 3.3 – Решить систему уравнений

$$\begin{cases} 2.0x_1 + 1.0x_2 - 0.1x_3 + 1.0x_4 = 2.7, \\ 0.4x_1 + 0.5x_2 + 4.0x_3 - 8.5x_4 = 21.9, \\ 0.3x_1 - 1.0x_2 + 1.0x_3 + 5.2x_4 = -3.9, \\ 1.0x_1 + 0.2x_2 + 2.5x_3 - 1.0x_4 = 9.9. \end{cases}$$

Прямой ход:

$$x_1 + 0.5x_2 - 0.05x_3 + 0.5x_4 = 1.35;$$

$$b_{12} = 0.5; \quad b_{13} = 0.05; \quad b_{14} = 0.5; \quad b_{15} = 1.35.$$

Из выражений (3.10) вычислим коэффициенты $a_{2j}^{(1)}$:

$$a_{22}^{(1)} = a_{22} - a_{21}b_{12} = 0.5 - 0.4 \cdot 0.5 = 0.3;$$

$$a_{23}^{(1)} = a_{23} - a_{21}b_{13} = 4 + 0.4 \cdot 0.05 = 4.02;$$

$$a_{24}^{(1)} = a_{24} - a_{21}b_{14} = -8.5 - 0.4 \cdot 0.5 = -8.7;$$

$$a_{25}^{(1)} = a_{25} - a_{21}b_{15} = 21.9 - 0.4 \cdot 1.35 = 21.36.$$

Аналогично вычислим коэффициенты $a_{ij}^{(1)}$ при $(i = 3, 4)$ и составим систему

$$\begin{cases} 0.3x_2 + 4.02x_3 - 8.7x_4 = 21.36, \\ -1.15x_2 + 1.015x_3 + 5.05x_4 = -4.305, \\ -0.3x_2 + 2.55x_3 - 1.5x_4 = 8.55. \end{cases}$$

Разделив первое уравнение системы на $a_{22}^{(1)} = 0.3$, получим

$$x_2 + 13.40x_3 - 29.00x_4 = 71.20.$$

Значит, $b_{23}^{(1)} = 13.40$; $b_{24}^{(1)} = -29.00$; $b_{25}^{(1)} = 71.20$.

Из (3.12) вычислим $a_{ij}^{(2)}$ для $i = 3$ и $j = 3, 4, 5$:

$$a_{33}^{(2)} = a_{33}^{(1)} - a_{32}^{(1)}b_{23}^{(1)} = 1.015 + 1.15 \cdot 13.40 = 16.425;$$

$$a_{34}^{(2)} = a_{34}^{(1)} - a_{32}^{(1)}b_{24}^{(1)} = 5.05 - 1.15 \cdot 29.00 = -28.3;$$

$$a_{35}^{(2)} = a_{35}^{(1)} - a_{32}^{(1)}b_{25}^{(1)} = -4.305 + 1.15 \cdot 71.20 = 77.575.$$

Аналогично, вычислив коэффициенты для $i = 4$, получим:

$$\begin{cases} 16.425x_3 - 28.3x_4 = 77.575, \\ 6.570x_3 - 10.200x_4 = 29.910. \end{cases}$$

Разделив первое уравнение на $a_{33}^{(2)} = 16.425$, получим:

$$x_3 - 1.72298x_4 = 4.72298,$$

где $b_{34}^{(2)} = -1.72298$; $b_{35}^{(2)} = 4.72298$.

По формуле (3.14) находим коэффициенты $a_{ij}^{(3)}$:

$$a_{44}^{(3)} = a_{44}^{(2)} - a_{43}^{(2)}b_{34}^{(2)} = -10.2 + 6,57 * 1.72298 = 1.1199786;$$

$$a_{45}^{(3)} = a_{45}^{(2)} - a_{43}^{(2)}b_{35}^{(2)} = 29.910 - 6,57 * 4.72298 = -1.1199786$$

и записываем одно уравнение с одним неизвестным:

$$1.1199786x_4 = -1.1199768.$$

$$x_1 + 0.5x_2 - 0.05x_3 + 0.5x_4 = 1.35;$$

$$x_2 + 13.4x_3 - 29x_4 = 71.2;$$

$$x_3 - 1.72298x_4 = 4.72298;$$

$$1.11998x_4 = -1.11998.$$

На этом закончен прямой ход.

Обратный ход: $x_4 = -1.000$;

$$x_3 = 4.72298 - 1.72298 = 3;$$

$$x_2 = 71.2 - 13.4 * 3 - 29 = 2;$$

$$x_1 = 1.35 - 0.5 * 2 + 0.05 * 3 + 0.5 = 1.$$

3.2 Схема Гаусса с выбором главного элемента

Рассмотрим СЛАУ

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = a_{1n+1}, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = a_{2n+1}, \\ \quad \quad \quad \Lambda \quad \quad \Lambda \quad \quad \Lambda \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = a_{nn+1}. \end{cases} \quad (3.17)$$

Запишем расширенную прямоугольную матрицу коэффициентов системы (3.17):

$$M = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1q} & a_{1n} & a_{1n+1} \\ \dots & & \dots & & \dots \\ a_{p1} & \dots & a_{pq} & \dots & a_{pn+1} \\ \dots & & \dots & & \dots \\ a_{n1} & \dots & \dots & \dots & a_{nn+1} \end{bmatrix}. \quad (3.18)$$

Среди элементов матрицы a_{ij} ($i, j = 1, \dots, n$) выберем наибольший по модулю, называемый *главным элементом*. Пусть им будет, например, элемент a_{pq} . Строка, содержащая главный элемент, называется **главной строкой**.

Далее вычислим множители $m_i = a_{iq} / a_{pq}$ для всех $i \neq p$. Затем преобразуем матрицу (3.18) следующим образом: из каждой i -ой неглавной строки вычитаем почленно главную строку, умноженную на m_i . В результате получим матрицу, у которой все элементы q -го столбца за исключением a_{pq} , равны 0. Отбрасывая этот столбец и главную строку, получим новую матрицу M_1 с числом строк и столбцов на единицу меньше.

Над матрицей M_1 повторим те же операции, после чего получим матрицу M_2 и т.д. Таким образом, продолжим до тех пор, пока не получим матрицу, содержащую одну строку из двух элементов, которую тоже считаем главной.

Затем объединим все главные строки, начиная с последней. После некоторой перестановки они образуют треугольную матрицу, эквивалентную исходной. На этом заканчивается этап вычислений, называемый **прямым ходом**. Решив систему с полученной треугольной матрицей коэффициентов, найдём последовательно значения неизвестных x_i ($i = 1, 2, \dots, n$). На этом заканчивается **обратный ход**.

Смысл выбора главного элемента состоит в том, чтобы сделать возможно меньшими числа m_i и тем самым уменьшить погрешность вычислений.

Пример 4 – Рассмотрим СЛАУ, состоящую из трех уравнений.

Запишем расширенную матрицу

$$M = \begin{bmatrix} 2 & 6 & -1 & -12 \\ 5 & -1 & 2 & 29 \\ -3 & -4 & 1 & 5 \end{bmatrix}; \quad a_{12} = 6 \quad - \quad \max.$$

$$m_2 = -1/6; \quad m_3 = -2/3.$$

$$M_1 = \begin{bmatrix} 16/3 & 11/6 & 27 \\ -5/3 & 1/3 & -3 \end{bmatrix}; \quad a_{11}^{(1)} = 16/3 \quad - \quad \max.$$

$$m_2 = -5/16.$$

$$M_2 = [87/96 \quad 174/32].$$

$$x_3 = 6; \quad x_1 = 3; \quad x_2 = -2.$$

4 Приближенное решение нелинейных и трансцендентных уравнений

Пусть дано уравнение

$$f(x) = 0, \quad (4.1)$$

где функция $f(x)$ определена и непрерывна в конечном или бесконечном интервале $a < x < b$.

Всякое значение ξ , обращающее функцию $f(x)$ в нуль, то есть такое, что $f(\xi) = 0$, называется корнем уравнения (4.1) или нулем функции $f(x)$. Предположим, что уравнение (4.1) имеет лишь **изолированные** корни, то есть для каждого корня существует окрестность, не содержащая других корней этого уравнения. Приближенное нахождение изолированных действительных корней уравнения (4.1) складывается обычно из двух этапов:

– **отделение корней**, то есть установление возможно тесных промежутков $[\alpha, \beta]$, в которых содержится один и только один корень исходного уравнения (4.1);

– **уточнение приближенных корней**, то есть доведение их до заданной степени точности.

4.1 Графическое решение уравнений

Действительные корни уравнения $f(x) = 0$ приближенно можно определить как абсциссы точек пересечения графика функции $y = f(x)$ с осью ОХ, как на рисунке 4.1, а. На практике часто бывает удобнее уравнение (4.1) заменить равносильным ему уравнением

$$\varphi(x) = \psi(x), \quad (4.2)$$

где функции $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ более простые, чем функция $f(x)$. Тогда, построив графики этих функций, искомые корни получим как абсциссы точек пересечения этих графиков, изображенных на рисунке 4.1, б.

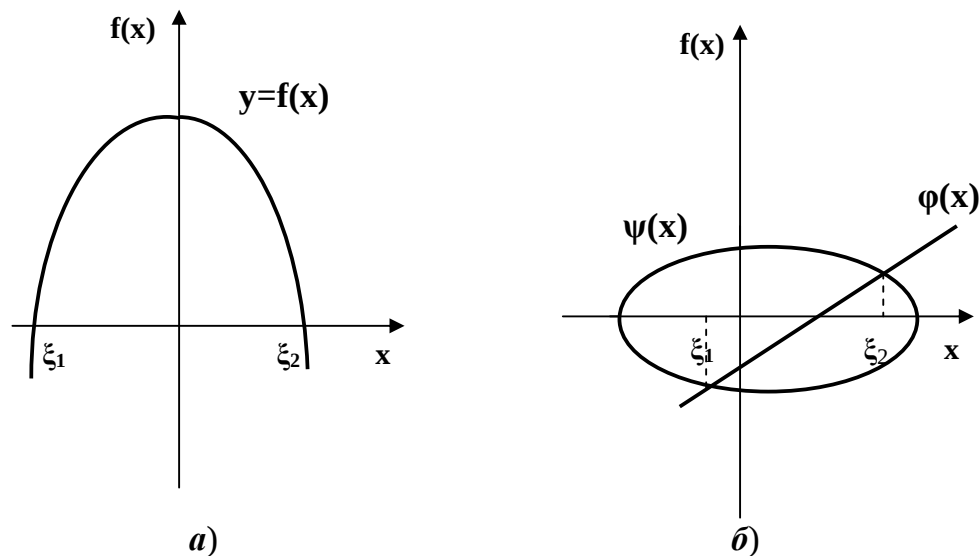


Рисунок 4.1 – Графический метод нахождения корней уравнения

4.2 Метод половинного деления (дихотомии)

Сформулируем без доказательства очень важную для рассмотрения дальнейших вопросов теорему.

Теорема: Если непрерывная функция $f(x)$ принимает значения разных знаков на концах отрезка $[\alpha, \beta]$, то есть $f(\alpha) \cdot f(\beta) < 0$, то внутри этого отрезка содержится по меньшей мере один корень уравнения $f(x) = 0$, а именно: найдётся хотя бы одно число $\xi \in [\alpha, \beta]$ такое, что $f(\xi) = 0$.

Пусть дано уравнение

$$f(x) = 0, \quad (4.3)$$

где функция $f(x)$ определена и непрерывна на интервале $[a, b]$ и $f(a) \cdot f(b) < 0$.

Для нахождения корня уравнения разделим отрезок $[a, b]$ пополам:

а) если $f((a + b)/2) = 0$, то $\xi = (a + b)/2$ является корнем уравнения (4.3);

б) если $f((a + b)/2) \neq 0$, то выберем ту половину отрезка $[a, (a + b)/2]$ или $[(a + b)/2, b]$, на концах которого функция $f(x)$ имеет противоположные знаки. Новый суженный отрезок $[a_1, b_1]$ снова разделим пополам и проведем тот же анализ и т.д.

Очевидно, что закончить уточнение значения корня можно при достижении условия $|a_j - b_j| < \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ - сколь угодно малое число. Второй способ закончить вычисления - задать максимальное значение невязки: $f((a_j + b_j)/2) < \varepsilon$.

Замечания

1 Метод половинного деления очень прост, здесь нет вычислительной формулы и можно обеспечить практически любую точность.

2 Как недостаток метода можно отметить его медленную сходимость (за один шаг интервал, где находится корень, сужается всего в два раза).

4.3 Метод хорд

Пусть дано уравнение

$$f(x) = 0, \quad (4.4)$$

где функция $f(x)$ определена и непрерывна на интервале $[a, b]$ и выполняется соотношение $f(a) \cdot f(b) < 0$.

Пусть для определенности $f(a) < 0, f(b) > 0$. Тогда вместо того, чтобы делить отрезок $[a, b]$ пополам, более естественно разделить его в отношении $-f(a):f(b)$. При этом новое значение корня определяется из соотношения

$$x_1 = a + h_1, \quad (4.5)$$

где

$$h_1 = \frac{-f(a)}{-f(a) + f(b)}(b - a) = \frac{-f(a)}{f(b) - f(a)}(b - a). \quad (4.6)$$

Далее этот прием применим к одному из отрезков $[a, x_1]$ или $[x_1, b]$, на концах которого функция $f(x)$ имеет противоположные знаки. Аналогично найдем второе приближение x_2 и т.д., показанное на рисунке 4.2.

Геометрически этот способ эквивалентен замене кривой $y = f(x)$ хордой, проходящей через точки $A(a, f(a))$ и $B(b, f(b))$.

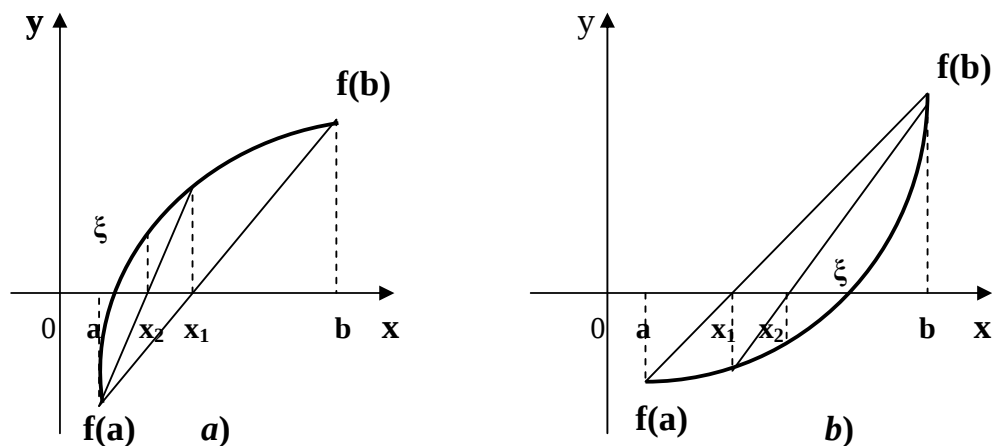


Рисунок 4.2 – Уточнение корня уравнения методом хорд

Действительно, уравнение хорды AB имеет вид

$$\frac{x - a}{b - a} = \frac{y - f(a)}{f(a) - f(b)}. \quad (4.7)$$

Учитывая, что при $x = x_1 \Rightarrow y = 0$, получим

$$x_1 = a - \frac{f(a)}{f(b) - f(a)}(b - a). \quad (4.8)$$

Полагая, что на отрезке $[a, b]$ вторая производная $f''(x)$ сохраняет постоянный знак, метод хорд сводится к двум различным вариантам.

1 Из рисунка 4.2, a видно, что неподвижна точка a , а точка b приближается к ξ , то есть

$$X_{n+1} = a - \frac{f(a)}{f(X_n) - f(a)}(X_n - a). \quad (4.9)$$

Преобразовав выражение (4.9), окончательно получим

$$X_{n+1} = X_n - \frac{f(X_n)}{f(X_n) - f(a)}(X_n - a). \quad (4.10)$$

2 Из рисунка 4.2, b видно, что точка b остается неподвижной, а точка a приближается к ξ , тогда вычислительная формула примет вид

$$X_{n+1} = X_n - \frac{f(X_n)}{f(b) - f(X_n)}(b - X_n). \quad (4.11)$$

Таким образом, для вычисления корня уравнения имеем две различные вычислительные формулы (4.10) и (4.11).

Какую точку брать за неподвижную?

Рекомендуется в качестве неподвижной выбирать ту точку, в которой выполняется соотношение

$$f(x) \cdot f''(x) > 0. \quad (4.12)$$

4.4 Метод Ньютона (метод касательных)

Пусть корень ξ уравнения

$$f(x) = 0 \quad (4.13)$$

отделен на отрезке $[a, b]$, причем первая и вторая производные $f'(x)$ и $f''(x)$ непрерывны и сохраняют определенные знаки при $a \leq x \leq b$. Найдя какое-нибудь n -ое приближение корня $x_n \approx \xi$ ($a \leq x_n \leq b$), мы можем уточнить его по методу Ньютона следующим образом. Пусть

$$\xi = x_n + h_n, \quad (4.14)$$

где h_n — величина малая. Отсюда по формуле Тейлора получим (ограничиваясь первым порядком малости относительно h_n)

$$f(x_n + h_n) = f(x_n) + h_n f'(x_n) = 0. \quad (4.15)$$

Следовательно,

$$h_n = -f(x_n) / f'(x_n). \quad (4.16)$$

Подставив полученное выражение в формулу (4.14), найдем следующее (по порядку) значение корня:

$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)} \quad (n = 0, 1, \dots). \quad (4.17)$$

Проиллюстрируем графически нахождение корня методом Ньютона на рисунке 4.3.

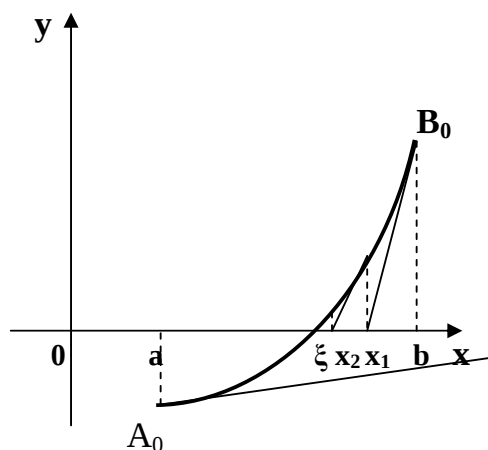


Рисунок 4.3 – Уточнение корня методом Ньютона

Если в качестве начального приближения выбрать точку $x_0 = B_0$, то процесс быстро сходится. Если же выбрать точку $x_0 = A_0$, то $x_1 \notin [a, b]$, и процесс нахождения корня расходится. Рекомендуется: в качестве x_0 выбрать точку, где $f(x) \cdot f''(x) > 0$.

5 Численное интегрирование

Если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $[a, b]$ и ее первообразная $F(x)$ есть элементарная функция, то определенный интеграл от этой функции в пределах от a до b может быть вычислен по формуле Ньютона-Лейбница

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a). \quad (5.1)$$

Для большинства элементарных функций первообразную $F(x)$ не удастся выразить через элементарные функции. Кроме того, при практических расчетах подынтегральная функция задается в виде таблиц. Все это приводит к необходимости замены интегрирования численными методами.

Задача численного интегрирования состоит в следующем: найти определенный интеграл на отрезке $[a, b]$, если подынтегральная функция на отрезке $[a, b]$ задана таблично. Формулы приближенного интегрирования называются квадратурными формулами.

Пусть дан определенный интеграл

$$I = \int_a^b f(x)dx \quad (5.2)$$

от непрерывной на $[a, b]$ функции $f(x)$. Приближенное равенство

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n p_i f(x_i), \quad (5.3)$$

где p_i - некоторые числа, x_i - некоторые точки отрезка $[a, b]$, называется *квадратурной формулой*, определяемой весами p_i и узлами x_i . Говорят, что квадратурная формула точна для многочленов степени m , если при замене $f(x)$ на произвольный алгебраический многочлен степени m при-

ближенное равенство $\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n p_i f(x_i)$ становится точным.

Введем на отрезке $[a, b]$ равномерную сетку с шагом h , тогда $x_i = a + ih$, где $(i = 0, 1, \dots, n; h = \frac{b-a}{n})$. Тогда справедливо равенство

$$I = \int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^n \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx. \quad (5.4)$$

Таким образом, для построения формулы численного интегрирования на отрезке $[a, b]$ достаточно построить квадратурную формулу на частичном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ и воспользоваться формулой (5.4).

5.1 Формула прямоугольников

На частичном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ заменим подынтегральную функцию полиномом Лагранжа нулевого порядка, построенным в одной точке. Естественно в качестве этой точки выбрать среднюю:

$$x_{i-0.5} = x_i - 0.5h. \quad (5.5)$$

Тогда получим формулу

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x)dx \approx f(x_{i-0.5})h. \quad (5.6)$$

Подставив выражение (5.6) в формулу (5.4), получим составную формулу средних прямоугольников:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n f(x_{i-0.5})h. \quad (5.7)$$

Графическая иллюстрация метода средних прямоугольников представлена на рисунке 5.1.

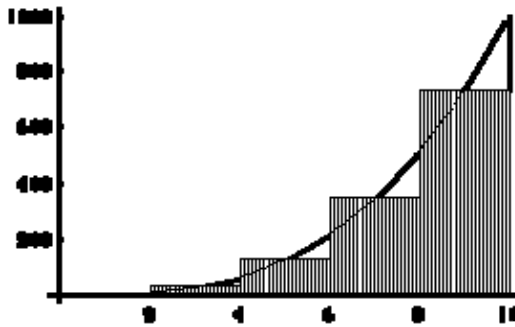


Рисунок 5.1 – Интегрирование методом средних прямоугольников

Погрешность формулы (5.7) определяется выражением

$$|\psi| \leq \frac{h^2(b-a)}{24} M_2. \quad (5.8)$$

Здесь $M_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$. Таким образом, погрешность формулы (5.7) пропорциональна $O(h^2)$.

Замечание. Формулу (5.7) можно представить в ином виде:

$$I \approx \sum_{i=1}^n hf(x_{i-1}); \quad I \approx \sum_{i=1}^n hf(x_i). \quad (5.9)$$

Эти формулы в выражении (5.9) называются формулой левых и правых прямоугольников соответственно. Графически метод левых и правых прямоугольников представлен на рисунке 5.2.

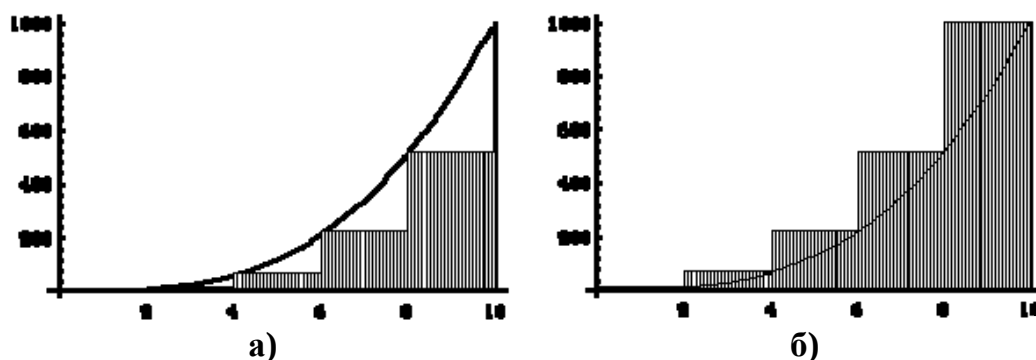


Рисунок 5.2 – Метод левых (а) и правых (б) прямоугольников

Однако из-за нарушения симметрии в формулах (5.9) их погрешность значительно больше, чем в методе средних прямоугольников и $\sim O(h)$.

5.2 Формула трапеций

Если на частичном отрезке подынтегральную функцию заменить полиномом Лагранжа первой степени, то есть

$$f(x) \approx L_{1,i}(x) = \frac{1}{h}[(x - x_{i-1})f(x_i) - (x - x_i)f(x_{i-1})], \quad (5.10)$$

тогда искомый интеграл запишется следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx &\approx \frac{1}{h} [f(x_i) \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_{i-1}) dx - \\ &- f(x_{i-1}) \int_{x_{i-1}}^{x_i} (x - x_i) dx] = \dots = \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} h. \end{aligned} \quad (5.11)$$

После подстановки выражения (5.11) в формулу (5.4) составная формула трапеций примет вид

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x) dx &\approx \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i) + f(x_{i-1})}{2} h = \\ &= h \left[\frac{1}{2} (f_0 + f_n) + f_1 + \dots + f_{n-1} \right]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Графически метод трапеций представлен на рисунке 5.3.

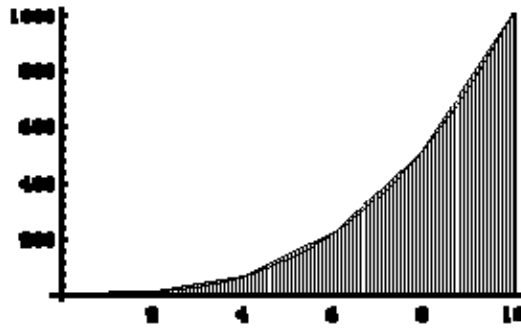


Рисунок 5.3 – Метод трапеций

Погрешность формулы (5.12) определяется выражением:

$$|\psi| \leq \frac{h^2(b-a)}{12} M_2. \quad (5.13)$$

Таким образом, погрешность метода трапеций $\Psi \sim O(h^2)$, но она в два раза больше, чем для формулы средних прямоугольников.

5.3 Формула Симпсона

В этом методе предлагается подынтегральную функцию на частичном отрезке аппроксимировать параболой, проходящей через точки $(x_j, f(x_j))$, где $j = i-1; i-0.5; i$, то есть подынтегральную функцию аппроксимируем интерполяционным многочленом Лагранжа второй степени:

$$\begin{aligned} f(x) \approx L_{2,i}(x) = & \frac{2}{h^2}[(x - x_{i-1/2})(x - x_i)f(x_{i-1}) - \\ & - 2(x - x_{i-1})(x - x_i)f(x_{i-1/2}) + (x - x_{i-1})(x - x_{i-1/2})f(x_i)]; \quad (5.14) \\ & x \in [x_{i-1}, x_i]. \end{aligned}$$

Проведя интегрирование, получим:

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_{2,i}(x) dx = & \frac{h}{6}(f_{i-1} + 4f_{i-1/2} + f_i), \quad (5.15) \\ h = & x_i - x_{i-1}. \end{aligned}$$

Это и есть **формула Симпсона** или формула парабол.

На отрезке $[a, b]$ формула Симпсона примет вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{6} [f_0 + f_n + 2(f_1 + f_2 + \dots + f_{n-1}) + 4(f_{1/2} + f_{3/2} + f_{5/2} + \dots + f_{n-1/2})]. \quad (5.16)$$

Графическое представление метода Симпсона показано на рисунке 5.4.

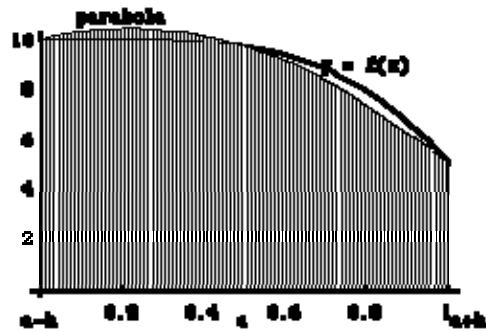


Рисунок 5.4 – Метод Симпсона

Избавимся в выражении (5.16) от дробных индексов, переобозначив переменные:

$$\begin{aligned} x_i &= a + 0.5h \cdot i; & f_i &= f(x_i); \\ i &= 0, 1, 2, \dots, 2n; & h \cdot n &= b - a. \end{aligned} \quad (5.17)$$

Тогда формула Симпсона примет вид

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{6n} [f_0 + f_{2n} + 2(f_2 + f_4 + \dots + f_{2n-2}) + 4(f_1 + f_3 + f_5 + \dots + f_{2n-1})]. \quad (5.18)$$

Погрешность формулы (5.18) оценивается следующим выражением:

$$|\psi| \leq \frac{h^4(b-a)}{2880} M_4, \quad (5.19)$$

где $h \cdot n = b - a$, $M_4 = \sup_{x \in [a, b]} |f^{IV}(x)|$. Таким образом, погрешность формулы Симпсона пропорциональна $O(h^4)$.

Замечание. Следует отметить, что в формуле Симпсона отрезок интегрирования обязательно разбивается на *четное* число интервалов.

6 Решение обыкновенных дифференциальных уравнений

Среди задач, с которыми приходится иметь дело в вычислительной практике, значительную часть составляют различные задачи, сводящиеся к решению обыкновенных дифференциальных уравнений. Обычно приходится прибегать к помощи приближенных методов решения подобных задач. В случае обыкновенных дифференциальных уравнений в зависимости от того, ставятся ли дополнительные условия в одной или нескольких точках отрезка изменения независимой переменной, задачи обычно подразделяются на *одноточечные* (задачи с начальными условиями или *задачи Коши*) и *многоточечные*. Среди многоточечных задач наиболее часто в прикладных вопросах встречаются так называемые *граничные задачи*, когда дополнительные условия ставятся на концах рассматриваемого отрезка.

В дальнейшем ограничимся рассмотрением численных методов решения задачи Коши. Для простоты изложения методов решения задачи рассмотрим случай одного обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка.

Пусть на отрезке $x_0 \leq x \leq b$ требуется найти решение $y(x)$ дифференциального уравнения

$$y' = f(x, y), \quad (6.1)$$

удовлетворяющее при $x = x_0$ начальному условию

$$y(x_0) = y_0. \quad (6.2)$$

Будем считать, что условия существования и единственности решения поставленной задачи Коши выполнены.

На практике найти общее либо частное решение задачи Коши удается крайне редко, поэтому приходится решать эту задачу приближенно. Отрезок $[x_0, b]$ накрывается сеткой (разбивается на интервалы) чаще всего с постоянным шагом h ($h = x_{n+1} - x_n$), и по какому-то решающему правилу находится значение $y_{n+1} = y(x_{n+1})$. Таким образом, в качестве решения задачи Коши численными методами мы получим таблицу, состоящую из двух векторов:

$x = (x_0, x_1, \dots, x_n)$ – вектора аргументов и соответствующего ему вектора функции $y = (y_0, y_1, \dots, y_n)$.

Численные методы (правила), в которых для нахождения значения функции в новой точке используется информация только об одной (предыдущей) точке, называются **одношаговыми**.

Численные методы (правила), в которых для нахождения значения функции в новой точке используется информация о нескольких (предыдущих) точках, называются **многошаговыми**.

Из общего курса обыкновенных дифференциальных уравнений широкое распространение получил аналитический метод, основанный на идее разложения в ряд решения рассматриваемой задачи Коши. Особенно часто

для этих целей используется ряд Тейлора. В этом случае вычислительные правила строятся особенно просто. При этом приближенное решение $y_m(x)$ исходной задачи ищут в виде

$$y_m(x) = \sum_{i=0}^m \frac{(x-x_0)^i}{i!} y^{(i)}(x_0), \quad (6.3)$$

$$x_0 \leq x \leq b.$$

Здесь $y^{(0)}(x_0) = y(x_0)$, $y^{(1)}(x_0) = y'(x_0) = f(x_0, y_0)$, а значения $y^{(i)}(x_0)$, $i = 2, 3, \dots, m$ находят по формулам, полученным последовательным дифференцированием уравнения (6.1):

$$\begin{aligned} y^{(2)}(x_0) &= y''(x_0) = f_x(x_0, y_0) + f(x_0, y_0) f_y(x_0, y_0); \\ y^{(3)}(x_0) &= y'''(x_0) = f_{x^2}(x_0, y_0) + 2f(x_0, y_0) f_y(x_0, y_0) + \\ &+ f^2(x_0, y_0) f_{y^2}(x_0, y_0) + f_y(x_0, y_0) [f_x(x_0, y_0) + \\ &+ f(x_0, y_0) f_y(x_0, y_0)]; \\ &\dots \\ y^{(m)}(x_0) &= F_m(f; f_x; f_{x^2}; f_{xy}; f_{y^2}; \dots; f_{x^{m-1}}; f_{y^{m-1}}) x = x_0, y = y_0. \end{aligned} \quad (6.4)$$

Для значений x , близких к x_0 , метод рядов (6.3) при достаточно большом значении m дает обычно хорошее приближение к точному решению $y(x)$ уравнения (6.1).

Однако с ростом расстояния $|x - x_0|$ погрешность приближенного равенства $y(x) \approx y_m(x)$, вообще говоря, возрастает по абсолютной величине, и разложение (6.3) становится вовсе неприемлемым, когда x выходит из области сходимости соответствующего ряда Тейлора.

Если в выражении (6.3) ограничиться $m = 1$, то для вычисления новых значений $y(x)$ нет необходимости пересчитывать значение производной, правда и точность решения будет невысока.

Графическая интерпретация этого метода приведена на рисунке 6.1.

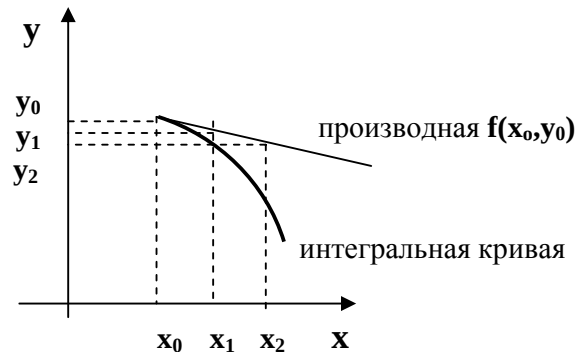


Рисунок 6.1 – Разложение функции в ряд Тейлора ($m=1$)

6.1 Метод рядов, не требующий вычисления производных правой части уравнения

Естественно поставить задачу о таком усовершенствовании приведенного выше одношагового метода, которое сохраняло бы основные его достоинства, но не было бы связано с нахождением значений производных правой части уравнения

$$y_m(x_{n+1}) \approx \sum_{i=0}^m \frac{h^i}{i!} y^{(i)}(x_n), \quad (6.5)$$

где $x_{n+1} = x_n + h$.

Чтобы выполнить это условие (последнее), производные $y^{(i)}(x)$, $i = 2, 3, \dots, m$, входящие в правую часть уравнения (6.5), можно заменить по формулам численного дифференцирования их приближенными выражениями через значение функции y' и учесть, что $y'(x) = f[x, y(x)]$.

В случае $m = 1$ приближенное равенство (6.5) не требует вычисления производных правой части уравнения и позволяет с погрешностью порядка h^2 находить значение $y(x_n + h)$ решения этого уравнения по известному его значению $y(x_n)$. Соответствующее одношаговое правило можно записать в виде

$$y_{n+1} = y_n + h f_n. \quad (6.6)$$

Правило (6.6) впервые было построено Эйлером и носит его имя. Иногда его называют также правилом *ломаных* или методом *касательных*.

Метод Эйлера имеет простую геометрическую интерпретацию, показанную на рисунке 6.2.

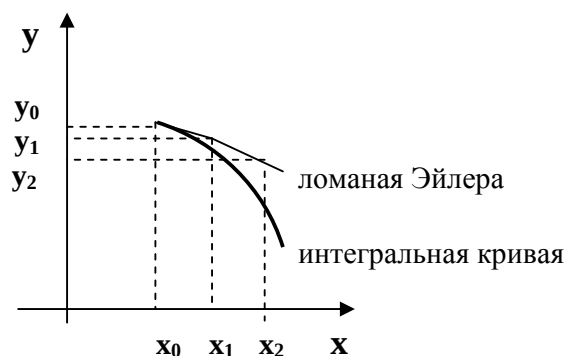


Рисунок 6.2 – Нахождение решения методом Эйлера

Замечание. Метод Эйлера имеет порядок точности $\sim h^2$ на одном шаге. Практическая оценка погрешности приближенного решения может быть получена по *правилу Рунге*.

6.2 Метод Рунге-Кутты

Изложим идею метода на примере задачи Коши:

$$\begin{aligned} y' &= f(x, y); \\ x_0 &\leq x \leq b; \\ y(x_0) &= y_0. \end{aligned} \tag{6.7}$$

Интегрируя это уравнение в пределах от x до $x + h$ ($0 < h < 1$), получим равенство

$$y(x + h) = y(x) + \int_x^{x+h} f[t, y(t)] dt, \tag{6.8}$$

которое посредством последнего интеграла связывает значения решения рассматриваемого уравнения в двух точках, удаленных друг от друга на расстояние шага h .

Для удобства записи выражения (6.8) используем обозначение $\Delta y = y(x + h) - y(x)$ и замену переменной интегрирования $t = x + \alpha h$. Окончательно получим:

$$\Delta y = h \int_0^1 f[x + \alpha h, y(x + \alpha h)] d\alpha. \quad (6.9)$$

Указав эффективный метод приближенного вычисления интеграла в выражении (6.9), мы получим при этом одно из правил численного интегрирования уравнения (6.7).

Постараемся составить линейную комбинацию величин φ_i , $i = 0, 1, \dots, q$, которая будет являться аналогом квадратурной суммы и позволит вычислить приближенное значение приращения Δy :

$$\Delta y \approx \sum_{i=0}^q a_i \varphi_i, \quad (6.10)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_0 &= hf(x, y); \\ \varphi_1 &= hf(x + \alpha_1 h; y + \beta_{10} \varphi_0); \\ \varphi_2 &= hf(x + \alpha_2 h; y + \beta_{20} \varphi_0 + \beta_{21} \varphi_1); \\ &\dots \end{aligned}$$

Метод четвертого порядка для $q = 3$, являющийся аналогом широко известной в литературе четырехточечной квадратурной формулы "трех восьмых", имеет вид

$$\Delta y \approx \frac{1}{8} (\varphi_0 + 3\varphi_1 + 3\varphi_2 + \varphi_3), \quad (6.11)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi_0 &= hf(x_n, y_n); \\ \varphi_1 &= hf\left(x_n + \frac{h}{3}, y_n + \frac{\varphi_0}{3}\right); \\ \varphi_2 &= hf\left(x_n + \frac{2}{3}h, y_n - \frac{\varphi_0}{3} - \varphi_1\right); \\ \varphi_3 &= hf(x_n + h, y_n + \varphi_0 - \varphi_1 + \varphi_2). \end{aligned}$$

Особо широко известно другое вычислительное правило типа Рунге-Кутта четвертого порядка точности:

$$\Delta y = \frac{1}{6}(\varphi_0 + 2\varphi_1 + 2\varphi_2 + \varphi_3), \quad (6.12)$$

где

$$\varphi_0 = hf(x_n, y_n),$$

$$\varphi_1 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\varphi_0}{2}\right),$$

$$\varphi_2 = hf\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{\varphi_1}{2}\right),$$

$$\varphi_3 = hf(x_n + h, y_n + \varphi_2).$$

Метод Рунге-Кутта имеет погрешность четвертого порядка ($\sim h^4$).

Правило Рунге. Если приближенный метод имеет порядок погрешности m , то погрешность можно приближенно оценить по формуле

$$\varepsilon(x_i) \approx h^m O(x_i) \approx \frac{y_i^h - y_i^{2h}}{2^m - 1}. \quad (6.13)$$

В формуле (6.13) $O(x_i)$ – главный член погрешности, y_i^h и y_i^{2h} – приближенные решения в точке x_i , найденные с шагом h и $2h$ соответственно.

Пример – Решить дифференциальное уравнение $y' = \frac{y-x}{y+x}$ на отрезке $[0, 1]$ с начальным условием $y(x=0) = 1$. Найти первые три точки, приняв шаг $h = 0.05$.

Решение. Поставленная задача была решена методом разложения в ряд Тейлора (6.3); методом Эйлера (6.6) и методом Рунге-Кутта (6.12). Для наглядности все полученные результаты сведем в табл. 6.1.

Таблица 6.1 – Результаты

x_i	Ряд Тейлора ($m=1$)	Метод Эйлера	Метод Рунге-Кутта					
	y_i	y_i	y_i	$f(x_i, y_i)$	φ_0	φ_1	φ_2	φ_3
0	1	1	1	1	-	-	-	-
0.05	1.05	1.05	1.0477	0.9089	0.05	0.0477	0.0476	0.0454
0.1	1.1	1.0931	1.0912	0.8321	0.0454	0.0435	0.0434	0.0416
0.15	1.15	1.1347	1.1311	0.7658	0.0416	0.0399	0.0399	0.0383

6.3 Многошаговые методы

Ранее нами были рассмотрены одношаговые методы решения задачи Коши. Эти методы, обладая рядом удобных для практики вычислений особенностей, страдают одним существенным недостатком. При построении этих методов привлекается информация о решаемой задаче только на отрезке длиной в один шаг, поэтому подобная информация на каждом этапе процесса должна быть получена заново, что предопределяет большую трудоемкость соответствующих вычислительных правил.

Если отказаться от требования одношаговости, можно вычислительные методы строить таким образом, чтобы часть получаемой информации могла быть использована повторно на нескольких следующих шагах вычислительного процесса. Такие методы, использующие информацию о решаемой задаче на отрезке длиной более одного шага, и называются многошаговыми.

Будем, как и раньше рассматривать задачу Коши:

$$\begin{aligned}y' &= f(x, y); \\ x_0 &\leq x \leq b; \\ y(x_0) &= y_0.\end{aligned}\tag{6.14}$$

Ограничимся рассмотрением многошаговых методов с равномерной сеткой:

$$x_i = x_0 + ih; \quad i = 0, 1, \dots, n; \quad n \cdot h = b - x_0.\tag{6.15}$$

Рассмотрим вычислительные правила вида

$$\begin{aligned}y_{n+1} &= y_n + h \sum_{i=-s}^q A_i f(x_{n-i}, y_{n-i}); \\ \sum_{i=0}^q A_i &= 1; \quad \sum_{i=0}^q A_i (-i)^j = \frac{1}{j+1} \quad (j = 1, 2, \dots, q).\end{aligned}\tag{6.16}$$

Среди вычислительных правил вида (6.16) особенно широко известны *экстраполяционные* (при $s = 0$) и *интерполяционные* (при $s = 1, A_{-1} \neq 0$).

7 Рекомендуемая литература

1. Демидович, Борис Павлович. Основы вычислительной математики: учебное пособие / Б. П. Демидович, И. А. Марон .— 7-е изд., стер. — СПб.: Лань, 2009 .— 672 с.
2. Копченова, Наталья Васильевна. Вычислительная математика в примерах и задачах : учебное пособие для вузов / Н. В. Копченова, И. А. Марон .— 3-е изд., стер. — СПб.: Лань, 2009 .— 366, [2] с.
3. Практикум по численным методам. / Л.Я. Егорова [и др.] – Томск: Изд. ТГУ, 1979. – 212 с.
4. Рашиков, Владимир Иванович. Численные методы решения физических задач : учебное пособие для вузов / В. И. Рашиков, А. С. Рошаль.— СПб. : Лань, 2005 .— 205 с.
5. Самарский, Александр Андреевич. Введение в численные методы: учебное пособие для вузов / А. А. Самарский.— 5-е изд., стер. — СПб. : Лань, 2009 .— 288 с.

Фаустова Инна Леонтьевна

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Учебное пособие

Научный редактор к. ф.-м. н., доцент кафедры ВМ НИ ТПУ Пахомова Е.Г.

Редактор Фирсова Р.В.

Технический редактор Корсакова Е.Г.

Подписано к печати _____ Формат 60х84/32.
Гарнитура Times New Roman. Бумага писчая № 2
Плоская печать. Усл.печ.л. 1,16 Уч.изд.л. 2,1
Тираж 25 экз. Заказ _____

Редакционно – издательский совет СТИ НИЯУ МИФИ
Отпечатано в ИПО СТИ НИЯУ МИФИ
636036, Томская обл., г. Северск,
пр. Коммунистический, 65