
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ МАТЕМАТИКА

КУРС ЛЕКЦИЙ

**А.Б. ГНАТЮК
Е.А. ЗАЛИПАЕВА
А.С. МОЧАЛОВ**

Министерство образования и науки
Российской Федерации
Федеральное государственное бюджетное
образовательное учреждение высшего
образования «Ивановский государственный
энергетический университет имени В. И. Ленина»

А.Б. Гнатюк
Е.А. Залипаева
А.С. Мочалов

Вычислительная математика

Курс лекций

Иваново 2016

УДК 519.6:004.4

Г56

Гнатюк А. Б., Залипаева Е. А., Мочалов А. С. Вычислительная математика: Курс лекций / ФГБОУВО «Ивановский государственный энергетический университет им. В. И. Ленина». – Иваново, 2016. – 104 с.

Курс лекций предназначен для студентов и магистров, использующих вычислительную математику и численные методы в учебном процессе и научно-исследовательской работе.

Ил. 34. Библиогр.: 10 назв.

Печатается по решению редакционно-издательского совета ФГБОУ ВО «Ивановский государственный энергетический университет имени В. И. Ленина».

Рецензент

Н. Н. Елизарова, кандидат технических наук (ФГБОУВО «Ивановский государственный энергетический университет имени В. И. Ленина»)

©А.Б. Гнатюк,
Е.А. Залипаева,
А. С. Мочалов, 2016

Содержание

Введение.....	5
Лекция 1. Основы теории погрешностей.....	8
1.1. Понятие вычислительного эксперимента.....	8
1.2. Точность вычислений, классификация погрешностей	10
1.3. Алгоритм решения и реализация в MS EXCEL.....	14
Лекция 2. Численное интегрирование.....	18
2.1. Геометрический смысл определенного интеграла.....	18
2.2. Метод прямоугольников.....	20
2.3. Метод трапеций.....	25
2.4. Метод Симпсона.....	27
2.5. Выбор шага интегрирования.....	28
2.6. Метод Монте-Карло.....	30
Лекция 3. Нелинейные уравнения и системы.....	35
3.1. Метод дихотомии.....	35
3.2. Метод хорд (ложного положения).....	38
3.3. Метод хорд с итерационной формулой.....	41
3.4. Метод отделения корней.....	42
3.5. Метод Ньютона (касательных).....	46
Лекция 4. Решение систем линейных уравнений.....	51
4.1. Метод Гаусса.....	51
4.2. Матричный метод.....	52
4.3. Вычисление определителей второго и третьего порядков.....	54

4.4. Решение системы линейных уравнений с тремя неизвестными методом Крамера	57
4.5. Метод простой итерации или метод Якоби.....	58
4.7. Метод Гаусса – Зейделя	62
Лекция 5. Решение систем нелинейных уравнений (СНУ) ...	65
5.1. Этапы решения СНУ	65
5.2. Метод Ньютона – Рафсона.....	69
Лекция 6. Обыкновенные дифференциальные уравнения	74
6.1. Метод Эйлера (Рунге-Кутта 1-го порядка).....	74
6.2. Модифицированный метод Эйлера (Рунге-Кутта 2-го порядка)	77
6.3. Исправленный метод Эйлера.....	79
Лекция 7. Интерполяция и аппроксимация	83
7.1. Задача интерполяции.....	83
7.2. Постановка задачи интерполяции	86
7.3. Локальная интерполяция. Кусочно–постоянная интерполяция.....	86
7.4. Кусочно–линейная интерполяция	87
7.5. Кубический интерполяционный сплайн.....	89
7.6. Полином Лагранжа	93
7.7. Подбор эмпирических формул	95
Список рекомендуемой литературы.....	102

Введение

Вычислительная математика — это раздел математики, связанный с производством разнообразных вычислений с применением компьютеров. В более узком понимании вычислительная математика представляет собой теорию численных методов решения типовых математических задач. Выделяют следующие ее направления: анализ математических моделей, разработка методов и алгоритмов решения стандартных математических задач, программирование используемых алгоритмов.

Анализ выбранных математических моделей для поставленной задачи начинается с анализа и обработки входной информации, что очень важно для более точных входных данных. Для такой обработки зачастую применяются методы математической статистики. Следующим шагом является численное решение математических задач и анализ результатов вычислений. Степень достоверности результатов анализа должна соответствовать точности входных данных. Появление более точных входных данных может потребовать усовершенствования построенной модели или её замену.

Методы и алгоритмы решения типовых математических задач с применением вычислительной техники носят название численных методов

Основное отличие вычислительной математики заключается в том, что при решении вычислительных задач человек оперирует машинными числами, которые являются дискретной проекцией вещественных чисел на конкретную архитектуру компьютера. Так, например, если взять машинное число длиной в 8 байт (64 бита), то в нём можно запомнить только 2^{64} разных чисел, поэтому важную роль в вычислительной математике играют оценки точности алгоритмов и их устойчивость к представлениям машинных чисел в компьютере.

Моделирование как один из методов научного познания дает возможность изучать поведение системы в заданных

экспериментатором условиях с минимальными материальными затратами. Построение математической модели состоит из нескольких этапов. Сначала формулируются цель и предмет исследования, затем выявляются структурные и функциональные элементы модели, взаимосвязи между ними, существенные факторы, отвечающие цели исследования, и отбрасывается то, что наименьшим образом влияет на ход решения задачи. На заключительном этапе проводятся расчеты по математической модели и анализ полученного решения. При этом для практических задач, поддающихся математическому моделированию, довольно редко удается найти точное (аналитическое) решение, и именно на завершающем этапе применяются численные методы. Выбор того или иного метода в значительной степени определяется постановкой задачи, а также используемой математической моделью объекта. Поэтому необходимо иметь представление о методах вычислительной математики как о наборе действующих способов решения численных задач и областях их применения, о реализации вычислений в виде алгоритмов для ЭВМ и анализе погрешности используемых методов с учетом точности представления числовых данных в ЭВМ.

Как правило, решение задач с использованием численных методов проводится на базе алгоритмических языков программирования либо на основе специализированных пакетов прикладных программ.

Численные методы — это методы приближенного решения задач прикладной математики, основанные на реализации алгоритмов, соответствующих математическим моделям. Наука, изучающая численные методы, называется также **численным анализом**, или **вычислительной математикой**. Численные методы, в отличие от аналитических, дают не общие, а частные решения. При этом требуется выполнить достаточное количество арифметических и логических действий над числовыми и логическими массивами.

В численном анализе используются два класса численных методов:

1. **Прямые методы**, позволяющие найти решение за определенное число операций.

2. **Итерационные методы**, основанные на использовании повторяющегося (циклического) процесса и позволяющие получить решение в результате последовательных приближений. Операции, входящие в повторяющийся процесс, составляют итерацию.

Решения, получаемые численными методами, в силу их приближенности содержат некоторые погрешности. Например, задачи численного интегрирования приближенно решаются для функций, заданных таблично, а также для функций, интегралы от которых не берутся в элементарных функциях, и т.д. Вместо функции, которую требуется проинтегрировать, интегрируют интерполяционный многочлен. Методы, основанные на замене подынтегральной функции интерполяционным многочленом, позволяют по параметрам многочлена оценить точность результата или же по заданной точности подобрать эти параметры.

Численные методы условно можно сгруппировать по способу аппроксимации подынтегральной функции. Методы Ньютона-Котеса основаны на аппроксимации функции полиномом n степени. Алгоритм этого класса отличается только степенью полинома. Как правило, узлы аппроксимирующего полинома – равноотносящие. Методы сплайн-интегрирования базируются на аппроксимации функции сплайн-кусочным полиномом. В методах наивысшей алгебраической точности (метод Гаусса-Лежандра) используются специально выбранные неравноотносящие узлы, обеспечивающие минимальную погрешность интегрирования при заданном (выбранном) количестве узлов. Методы Монте-Карло используются чаще всего при вычислении кратных интегралов, узлы выбираются случайным образом, ответ носит вероятностный характер.

Лекция 1. Основы теории погрешностей

1.1. Понятие вычислительного эксперимента

Вычислительный (численный) эксперимент разбивается на следующие этапы:

1. Создание модели, фиксирующей главные исследуемые факторы. Одновременно формулируются рамки применимости модели.

2. Предварительное исследование математической модели: проверка корректности постановки задачи, существования и единственности решения.

3. Разработка метода расчета сформулированной задачи, построение эффективных вычислительных алгоритмов.

4. Создание программы, осуществляющей моделирование физического объекта, включающей в себя реализации используемых численных методов, проверки корректности ввода исходных и вывода результирующих данных

5. Сравнение полученных результатов моделирования с тестовыми примерами и экспериментальными данными; решение вопроса о правильности практического моделирования (иначе повторяются пп. 3 и 4).

6. Решение вопроса о достоверности предложенной математической модели. Если модель не описывает экспериментальные данные, возврат на п.1.

Таким образом, численный эксперимент – это не однократное вычисление по некоторому набору формул, а многостадийный процесс программирования, анализа результатов и их погрешностей.

Задача $y = A(x)$ называется **корректно поставленной**, если для любых входных данных x , принадлежащих некоторому классу, решение y **существует – единственно и устойчиво** по входным данным.

Класс может представлять собой координатное бесконечномерное пространство, множество непрерывных функций и др.

Численный алгоритм – однозначная последовательность действий, которые могут привести к одному решению.

Отсутствие устойчивости обычно означает, что сравнительно небольшой погрешности δx соответствует весьма большое δy , а значит, получаемое решение будет далеко от истинного. К такой задаче численные методы применять бессмысленно, ибо погрешности численного расчета будут катастрофически нарастать. Устойчивость задачи определяется математической формулировкой и используемым алгоритмом расчета. Пример неустойчивой задачи в первом случае:

$$\text{Система } \begin{cases} 300x_1 + 400x_2 = 700, \\ 100x_1 + 133x_2 = 233 \end{cases} \text{ имеет решение}$$

$$\begin{cases} x_1 = 1, \\ x_2 = 1, \end{cases} \text{ однако система } \begin{cases} 300x_1 + 400x_2 = 700, \\ 100x_1 + 132x_2 = 233 \end{cases} \text{ имеет}$$

$$\text{решение } \begin{cases} x_1 = -3, \\ x_2 = 4, \end{cases} \text{ то есть разница в коэффициенте менее 1 \%}$$

приводит к изменению решения в 300 %.

Пример алгоритмической неустойчивости – вычисление производных численными методами: какой бы метод мы не использовали, приходится вычитать весьма мало различающиеся числа.

В настоящее время развиты методы решения многих некорректных задач, которые основаны на решении вспомогательной корректной задачи, близкой к исходной.

Если выполняется условие для норм (модулей) $\|\partial y\| = C \|\partial x\|$, то задача устойчива. Однако если константа C очень велика, то фактически наблюдается *слабая устойчивость*. Такую задачу называют *плохо обусловленной*. Пример – дифференциальное уравнение $y''(x) = y(x)$ с начальными условиями $y(0) = 1, y'(0) = -1$. Общее решение дифференциального уравнения есть $y(x) = \frac{1}{2}(y(0) + y'(0))e^x + \frac{1}{2}(y(0) - y'(0))e^{-x}$.

Начальные условия приводят к обнулению первого слагаемого, но если из-за погрешности начальных данных это будет не так, то при возрастании x влияние первого слагаемого будет катастрофически нарастать.

1.2. Точность вычислений, классификация погрешностей

Во всех случаях математическая точность решения должна быть в 2-4 раза выше, чем ожидаемая физическая точность модели. Более высокая математическая точность, как и более низкая, будет неадекватна для данной модели.

Существуют четыре источника погрешности результата:

1) **погрешность математической модели** – связана с ее несоответствием физической реальности, так как абсолютная истина недостижима. 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.

2) **погрешность исходных данных**, принятых для расчета, – это **неустраняемая погрешность**. Ее 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 анализе результатов эксперимента.

3) **погрешность метода** – основана на дискретном характере любого численного алгоритма. Это значит, что вместо точного решения исходной задачи метод находит решение другой задачи, близкой в каком-то смысле (например, по норме банахова пространства) к искомому. Погрешность метода – основная характеристика любого численного алгоритма. Погрешность метода должна быть в 2-5 раз меньше неустраняемой погрешности.

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

Можно проиллюстрировать определения следующим образом: пусть имеется реальный маятник, совершающий затухающие колебания, начинающий движение в момент $t = t_0$. Требуется найти угол отклонения φ от вертикали в момент t_1 . Движение маятника мы можем описать следующим дифференциальным уравнением:

$$l \frac{d^2 \varphi}{dt^2} + g \sin \varphi + \mu \frac{d\varphi}{dt} = 0,$$

где l – длина маятника; g – ускорение силы тяжести; μ – коэффициент трения.

Как только принимается такое описание задачи, решение уже приобретает неустранимую погрешность, в частности потому, что реальное трение зависит от скорости не совсем линейно (погрешность модели). Кроме того, воспроизведя реальный эксперимент, мы зададим l , g (в известной точке планеты), μ с некоторой точностью и получим набор значений с погрешностью, которую можем оценить из анализа статистики некоторого числа однотипных опытов (погрешность исходных данных). Взятые в модели дифференциальное уравнение нельзя решить в явном виде, для его решения требуется применить какой-либо численный метод, имеющий заранее известную погрешность, которая должна быть меньше неустранимой погрешности. После совершения вычислений мы получим значения с погрешностью, большей, нежели погрешность метода, так как к ней прибавится погрешность округления.

Рассмотрим правила расчета погрешности округления.

1. Сложение и вычитание приближенных чисел.

Введем в рассмотрение два числа a и b , называемых *приближенными*, то есть это есть оценка точных значений A и B , известных с *абсолютными погрешностями* $\pm \varepsilon_a$ и $\pm \varepsilon_b$. Знаки этих погрешностей нам неизвестны, следовательно, для обеспечения достоверности конечного результата мы должны

взять наихудший случай, когда погрешности складываются. Таким образом, формулируются следующие правила:

- Абсолютная погрешность **суммы** приближенных чисел равна **сумме** абсолютных погрешностей слагаемых.
- Абсолютная погрешность **разности** приближенных чисел равна **сумме** абсолютных погрешностей слагаемых.
- *Относительной погрешностью* приближенного числа a будет являться величина $\delta_a \leq \left| \frac{\varepsilon_a}{a} \right|$. По этому же правилу определим относительную погрешность **суммы** приближенных чисел a и b как $\delta \leq \left| \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{a + b} \right|$.

При этом можно показать:

- Относительная погрешность суммы слагаемых одного знака заключена между наименьшей и наибольшей относительными погрешностями слагаемых:

$$\delta_{\min} \leq \delta \leq \delta_{\max}.$$
- Для разности двух приближенных чисел одного знака величина относительной погрешности $\delta \leq \left| \frac{\varepsilon_a + \varepsilon_b}{a - b} \right|$ может быть сколь угодно большой.

2. Умножение и деление приближенных чисел.

Очевидно, что приближенное число

$$a = A \pm \varepsilon_a = A \left(1 \pm \frac{\varepsilon}{A} \right) = A(1 \pm \delta_a).$$

Тогда для произведения

$$c = C(1 \pm \delta_{ab}) = ab = AB(1 \pm \delta_a) \cdot (1 \pm \delta_b) = AB(1 \pm (\delta_a + \delta_b) + \delta_a \delta_b).$$

Если пренебречь последним малым слагаемым в скобках, то можно сформулировать следующее правило:

- Относительная погрешность **произведения** приближенных чисел равна **сумме** относительных погрешностей множителей $\delta_{ab} = \delta_a + \delta_b$.

Так как деление на число b равнозначно умножению на $1/b$, то справедливо утверждение

- Относительная погрешность **частного** приближенных чисел равна **сумме** относительных погрешностей делимого и делителя.

Следовательно, при умножении и делении приближенных чисел необходимо принимать во внимание количество значащих цифр, характеризующих относительную точность числа, а не количество десятичных знаков, обуславливающих его абсолютную погрешность.

Совершенно очевидно, что при большом количестве действий такого сорта правила нельзя считать удовлетворительными, так как погрешности будут иметь разные знаки и компенсировать друг друга. *Статистическая оценка* показывает, что при N одинаковых действиях среднее значение суммарной ошибки больше единичной в \sqrt{N} раз, если нет систематических причин для накопления погрешности. Систематические причины возникают, если, например, в алгоритме вычитаются близкие по величине числа.

При любых расчетах надо устанавливать такую точность вычислений, чтобы погрешность округления была существенно меньше всех остальных погрешностей.

Пример 1.1.

Ознакомьтесь с основными понятиями теории погрешностей.

Дан ряд $\sum_{n=1}^{\infty} a_n$. Найти сумму ряда аналитически. Вычислить

значения частичных сумм ряда $S_N = \sum_{n=1}^N a_n$ и найти величину погрешности при значениях $N = 10, 10^2, 10^3, 10^4$.

Вариант	a_n	Вариант	a_n
0	$\frac{48}{5(n^2 + 6n + 5)}$	5	$\frac{24}{n^2 + 4n + 3}$
1	$\frac{60}{n^2 + 6n + 8}$	6	$\frac{144}{5(n^2 + 6n + 8)}$
2	$\frac{36}{11(n^2 + 5n + 4)}$	7	$\frac{32}{n^2 + 9n + 20}$
3	$\frac{46}{n^2 + 5n + 6}$	8	$\frac{84}{13(n^2 + 14n + 48)}$
4	$\frac{12}{5(n^2 + 6n + 8)}$	9	$\frac{20}{n^2 + 4n + 3}$

1.3. Алгоритм решения и реализация в MS EXCEL

Найти сумму ряда аналитически.

Используя функцию $S(N) = \sum_{n=1}^N a_n$, вычислить значения

частичных сумм ряда при указанных значениях N.

Для каждого N вычислить величину абсолютной погрешности.

Пусть a – точное значение, a^* – приближенное значение некоторой величины. Абсолютной погрешностью приближенного значения a^* называется величина $\Delta a^* = |a - a^*|$.

Определить количество верных цифр в $S(N)$.

Значащими цифрами числа a^* называют все цифры в его записи, начиная с первой ненулевой слева.

Значащую цифру числа a^* называют верной, если абсолютная погрешность числа не превышает единицы разряда, соответствующего этой цифре.

Приближенное число можно представить в виде конечной десятичной дроби

$$a^* = a_m 10^m + a_{m-1} 10^{m-1} + a_{m-2} 10^{m-2} + \dots + a_{m-n+1} 10^{m-n+1}$$

$$a_m \neq 0.$$

Тогда, если цифра a_k в изображении числа a^* верная, то выполняется неравенство $|a - a^*| \leq \omega 10^k$, $\omega \leq 1$, чаще всего $\omega = 0,5$.

Аналитическое решение выглядит следующим образом:

Дан ряд $\sum_{n=0}^N \frac{72}{n^2 + 5n + 4}$.

$$\begin{aligned} S_N &= \sum_{n=0}^N \frac{72}{n^2 + 5n + 4} = 72 \sum_{n=0}^N \frac{1}{(n+1)(n+4)} = \frac{72}{3} \sum_{n=0}^N \left(\frac{1}{n+1} - \frac{1}{n+4} \right) = \\ &= 24 \cdot \left[\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{5} \right) + \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{6} \right) + \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{7} \right) + \left(\frac{1}{5} - \frac{1}{8} \right) + \dots \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{1}{n-1} - \frac{1}{n+2} \right) + \left(\frac{1}{n} - \frac{1}{n+3} \right) + \left(\frac{1}{n+1} - \frac{1}{n+4} \right) \right] = \\ &= 24 \cdot \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \frac{1}{4} - \frac{1}{N+2} - \frac{1}{N+3} - \frac{1}{N+4} \right) = 24 \cdot \left(\frac{13}{12} - \frac{1}{N+2} - \frac{1}{N+3} - \frac{1}{N+4} \right); \end{aligned}$$

$$S = \lim_{N \rightarrow \infty} S_N = \lim_{N \rightarrow \infty} 24 \cdot \left(\frac{13}{12} - \frac{1}{N+2} - \frac{1}{N+3} - \frac{1}{N+4} \right) = 24 \cdot \frac{13}{12} = 26.$$

Для реализация алгоритма в MS Excel нужно создать вспомогательный столбец n для расчета суммы ряда:

создать: Правка – Заполнить – Прогрессия... (рис. 1.1.):

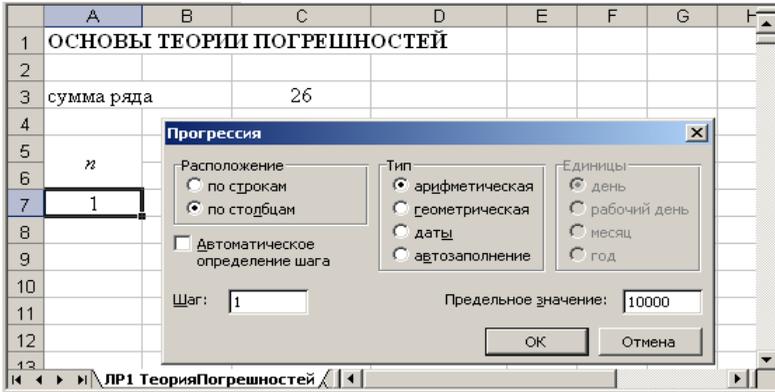


Рис. 1.1. Вид окна «Прогрессия»

Таким образом мы получим результат, изображенный на рис. 1.2. и 1.3.

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПОГРЕШНОСТЕЙ										
сумма ряда			26							
<i>n</i>	<i>N</i>	Частичная сумма ряда	Погрешность	Разряды					Количество верных цифр	
1	10	20,43956044	5,56	1	0	-1	-2	-3	1	
2	100	25,30092694	0,699	1	1	0	0	0	2	
3	1000	25,92821531	0,072	1	1	1	0	0	3	
4	10000	25,99280216	0,0072	1	1	1	1	0	4	
5										
6										

Рис. 1.2. Вид рабочего листа с результатом расчета

ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПОГРЕШНОСТЕЙ										
сумма ряда			26							
<i>n</i>	<i>N</i>	Частичная сумма ряда	Погрешность	Разряды					Количество верных цифр	
1	10	$\{=СУММ(7:7)/1\}$	$\{=ABS(\$C\$3-C7)\}$	1	0	-1	-2	-3	$\{=СУММ(E7:I7)\}$	
2	100									
3	1000									
4	10000									
5										

Рис. 1.3. Вид рабочего листа с формулами

Примечания: фигурные скобки означают, что соответствующая формула выводится массивом, т. е. с использованием комбинации **Ctrl + Shift + Enter**.

Лекция 2. Численное интегрирование

2.1. Геометрический смысл определенного интеграла

Необходимость вычисления значений определенных интегралов при моделировании возникает достаточно часто. Формула Ньютона-Лейбница.

$$I^* = \int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a). \quad (2.1)$$

Данная формула имеет ограниченное применение:

- не позволяет вычислить интегралы от таблично заданной подынтегральной функции $f(x)$;
- не каждая подынтегральная функция имеет первообразную $F(x)$.

Численные методы интегрирования универсальны: позволяют вычислить значение определенного интеграла непосредственно по значениям подынтегральной функции $f(x)$ независимо от способа ее задания или вида аналитического выражения.

Рассмотрим, в чем заключается геометрический смысл определенного интеграла.

Геометрический смысл определенного интеграла – это площадь криволинейной трапеции, ограниченной осью OX , кривой $f(x)$, и прямыми $x=a$ и $x=b$ (рис.2.1).

Численные методы интегрирования основаны на различных способах оценки этой площади, поэтому полученные формулы численного интегрирования называются **квadrатурными** (формулами вычисления площади).

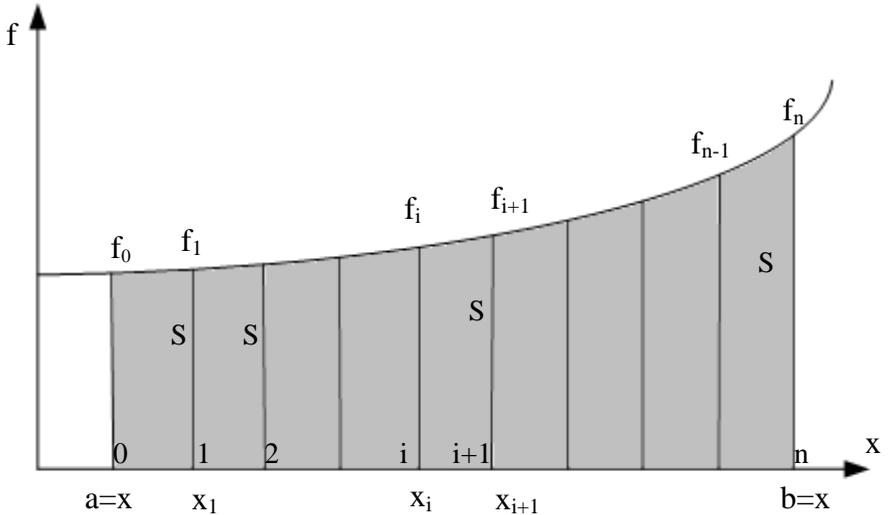


Рис. 2.1. Геометрический смысл определённого интеграла

Рассмотрим получение и применение простейших формул.

Отрезок $[a, b]$ делят на n необязательно равных частей – **элементарных отрезков**. Такое деление отрезка принято называть сеткой, а точки x_0, x_1, \dots, x_n – узлами сетки.

Если сетка равномерная, то $h = \frac{b-a}{n}$ – шаг сетки, при интегрировании – шаг интегрирования, а координата i -го узла вычисляется по формуле:

$$x_i = a + i \cdot h, \quad i = 0, n. \quad (2.2)$$

Полная площадь криволинейной трапеции состоит из n элементарных криволинейных трапеций – элементарных площадей:

$$I^* = \sum_{i=0}^{n-1} S_i. \quad (2.3)$$

Квадратурные формулы отличаются друг от друга способом оценки значения S_i – площади элементарной криволинейной трапеции.

Рассмотрим получение простейших формул для часто используемой равномерной сетки.

2.2. Метод прямоугольников

Площадь элементарной трапеции можно оценить (приблизительно вычислить) как площадь прямоугольника со сторонами $x_{i+1} - x_i = h$ и f_i . Тогда $S_i \approx f_i \cdot h$ и значение интеграла

$$I^* = \sum_{i=0}^{n-1} S_i \approx \sum_{i=0}^{n-1} f_i \cdot h = h \sum_{i=0}^{n-1} f_i = h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i) = h \sum_{i=0}^{n-1} f(a + i \cdot h). \quad (2.3)$$

На рис. 2.2 представлен геометрический смысл оценки элементарной площади S_i левым прямоугольником

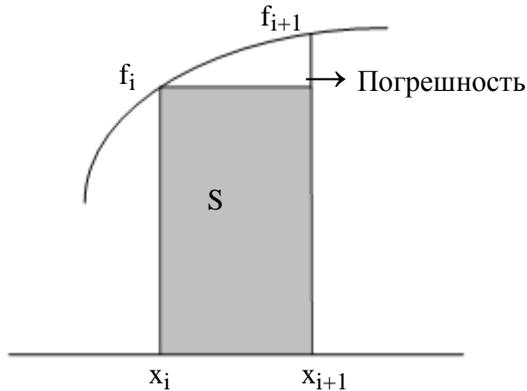


Рис. 2.2. Оценка элементарной площади S_i левым прямоугольником

Полученная формула называется формулой **левых прямоугольников**, т.к. для оценки площади использовалось левое основание элементарной криволинейной трапеции.

Аналогично можно получить формулу **правых прямоугольников** (рис. 2.3).

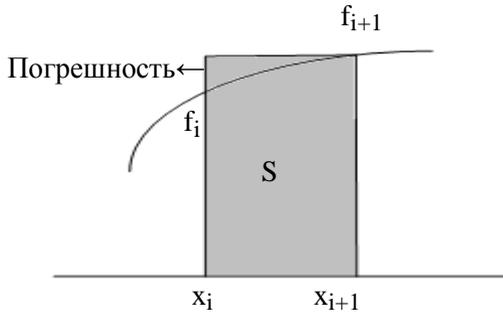


Рис. 2.3. Оценка элементарной площади S_i правым прямоугольником

Для данного случая $S_i \approx f_{i+1} \cdot h$ и тогда значение интеграла

$$I^* = \sum_{i=0}^{n-1} S_i \approx \sum_{i=0}^{n-1} f_{i+1} \cdot h = h \sum_{i=1}^n f_i = h \sum_{i=1}^n f(x_i) = h \sum_{i=1}^n f(a + i \cdot h). \quad (2.4)$$

Данные формулы не находят широкого применения, т.к. имеют большую погрешность, пропорциональную величине шага:

$$\delta_M \approx O(h). \quad (2.5)$$

Для повышения точности площадь S_i можно оценить, используя прямоугольник со стороной, равной значению подынтегральной функции в середине элементарного отрезка:

$$\tilde{f}_i = f\left(x_i + \frac{h}{2}\right). \quad (2.6)$$

На рис.2.4 представлен геометрический смысл оценки элементарной площади S_i центральным прямоугольником.

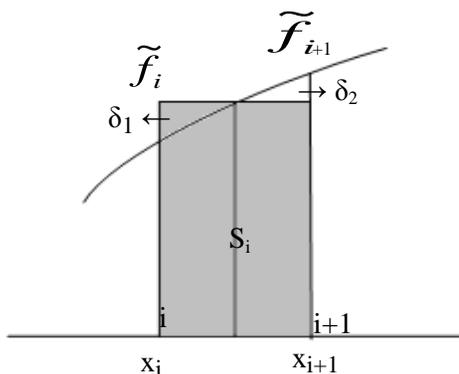


Рис. 2.4. Оценка элементарной площади S_i центральным прямоугольником

Для данного случая $S_i \approx \tilde{f}_i \cdot h$, и формула центральных прямоугольников имеет вид

$$I^* = \sum_{i=0}^{n-1} S_i \approx \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{f}_i \cdot h = h \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{f}_i = h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) = h \sum_{i=0}^{n-1} f\left(a + i \cdot h + \frac{h}{2}\right). \quad (2.7)$$

Как видно из рис. 2.4, погрешность в оценке площади S_i в данном случае существенно меньше, чем в двух предыдущих (погрешность оценивается разницей площадей δ_1 и δ_2).

Погрешность метода пропорциональна квадрату величины шага:

$$\delta_M \approx O(h^2). \quad (2.8)$$

Рассмотрим пример вычисления значения определенного интеграла.

Пример 2.1. Вычислить значение определённого интеграла по формулам прямоугольников:

$$I = \int_{0.5}^{2.0} (x^2 + 1) dx. \quad (2.9)$$

Точное значение легко вычисляется по формуле Ньютона – Лейбница:

$$\begin{aligned}
 I &= \left. \left(\frac{x^3}{3} + x \right) \right|_{0,5}^2 = \frac{2^3}{3} + 2 - \left(\frac{0,5^3}{3} + 0,5 \right) = \left(\frac{8}{3} + 2 \right) - \left(\frac{1}{8 \cdot 3} + \frac{1}{2} \right) = \\
 &= \frac{14}{3} - \frac{13}{24} = \frac{112 - 13}{24} = \frac{99}{24} = \frac{33}{8} = 4,125.
 \end{aligned} \tag{2.10}$$

Для вычисления интеграла по квадратурной формуле необходимо выбрать число узлов n .

Пусть $n=5$, тогда

$$h = \frac{b-a}{n} = \frac{2-0,5}{5} = 0,3. \tag{2.11}$$

Проведем расчет по формуле левых прямоугольников:

$$\begin{aligned}
 I_{\text{лп}} &= h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f(a + i \cdot h) = 0,3 \sum_{i=0}^4 f(0,5 + i \cdot 0,3) = \\
 &= 0,3(f(0,5) + f(0,8) + f(1,1) + f(1,4) + f(1,7)) = \\
 &= 0,3((0,5^2 + 1) + (0,8^2 + 1) + (1,1^2 + 1) + (1,4^2 + 1) + (1,7^2 + 1)) = \\
 &= 0,3(1,25 + 1,64 + 2,21 + 2,96 + 3,89) = 0,3 \cdot 11,95 = 3,585.
 \end{aligned} \tag{2.12}$$

Погрешность расчета

$$\delta \approx I^* - I_{\text{лп}} = 4,125 - 3,585 = 0,54. \tag{2.13}$$

Знак и значение погрешности можно оценить по геометрической иллюстрации вычисления интеграла по квадратурной формуле (рис.2.5).

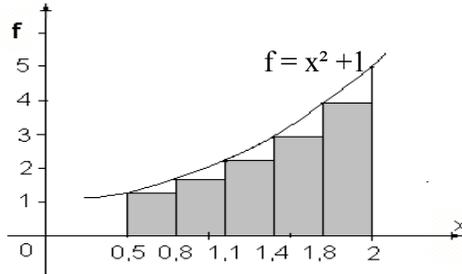


Рис. 2.5. Геометрическая иллюстрация вычисления значения определённого интеграла по формуле левых прямоугольников

Расчет по формуле правых прямоугольников:

$$\begin{aligned}
 I_{\text{пр}} &= h \cdot \sum_{i=1}^n f(a + i \cdot h) = 0,3 \sum_{i=1}^5 f(0,5 + i \cdot 0,3) = \\
 &= 0,3(f(0,8) + f(1,1) + f(1,4) + f(1,7) + f(2,0)) = \\
 &= 0,3((0,8^2 + 1) + (1,1^2 + 1) + (1,4^2 + 1) + (1,7^2 + 1) + (2,0^2 + 1)) = \\
 &= 0,3(1,64 + 2,21 + 2,96 + 3,89 + 5) = 4,71 .
 \end{aligned} \tag{2.14}$$

Погрешность расчета

$$\delta \approx 4,125 - 4,71 = -0,585. \tag{2.15}$$

Для повышения точности необходимо увеличить n или использовать более точные квадратурные формулы.

Проведем расчет по формуле центральных прямоугольников:

$$\begin{aligned}
 I_{\text{цп}} &= h \cdot \sum_{i=0}^{n-1} f\left(a + i \cdot h + \frac{h}{2}\right) = 0,3 \sum_{i=0}^4 f(i \cdot 0,3 + 0,15) = \\
 &= 0,3(f(0,65) + f(0,95) + f(1,25) + f(1,55) + f(1,85)) = \\
 &= 0,3((0,65^2 + 1) + (0,95^2 + 1) + (1,25^2 + 1) + (1,55^2 + 1) + \\
 &+ (1,85^2 + 1)) = 0,3(1,4225 + 1,9025 + 2,5625 + 3,4025 + 4,4225) = \\
 &= 4,114.
 \end{aligned} \tag{2.16}$$

Погрешность расчета

$$\delta \approx 4,125 - 4,114 = 0,011. \tag{2.17}$$

Формула центральных прямоугольников на порядок точнее предыдущих формул.

2.3. Метод трапеций

В данном методе элементарная криволинейная трапеция заменяется трапецией (кривая $f(x)$ заменяется хордой CD).

Оценка элементарной площади S_i трапецией представлена на рис.2.6.

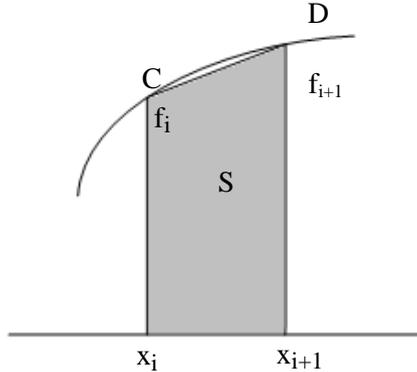


Рис. 2.6. Оценка элементарной площади S_i трапецией

Из рисунка видно, что

$$S_i \approx \frac{f_i + f_{i+1}}{2} \cdot h. \quad (2.18)$$

Отсюда

$$\begin{aligned} I^* &= \sum_{i=0}^{n-1} S_i \approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{f_i + f_{i+1}}{2} \cdot h = h \cdot \left(\frac{f_0 + f_1}{2} + \frac{f_1 + f_2}{2} + \frac{f_2 + f_3}{2} + \dots + \right. \\ &+ \left. \frac{f_{n-2} + f_{n-1}}{2} + \frac{f_{n-1} + f_n}{2} \right) = h \cdot \left(\frac{f_0 + f_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f_i \right) = \\ &= h \cdot \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(a + i \cdot h) \right). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Погрешность формулы трапеций пропорциональна квадрату шага:

$$h, \text{ причем } \delta_M \approx O(h^2), \quad (2.20)$$

т.е. формулы центральных прямоугольников и трапеций имеют близкую точность.

Пример 2.2. Вычислить значение ранее рассмотренного определённого интеграла

$$I = \int_{0,5}^2 (x^2 + 1) dx . \quad (2.21)$$

при $n=5$, $h=0,3$ по формуле трапеций.

$$\begin{aligned} I_{\text{тр}} &= h \cdot \left[\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(a + i \cdot h) \right] = \\ &= 0,3 \left[\frac{f(0,5) + f(2)}{2} + \sum_{i=1}^4 f(0,5 + 0,3 \cdot i) \right] = \\ &= 0,3 \left(\frac{(0,5^2 + 1) + (2^2 + 1)}{2} + f(0,8) + f(1,1) + f(1,4) + f(1,8) \right) = \\ &= 0,3 \left(\frac{1,25 + 5}{2} + (0,8^2 + 1) + (1,1^2 + 1) + (1,4^2 + 1) + (1,8^2 + 1) \right) = \\ &= 0,3(2,125 + 1,64 + 2,21 + 2,96 + 3,89) = 0,3 \cdot 13,825 = 4,1475 . \end{aligned} \quad (2.22)$$

Погрешность расчета:

$$\delta \approx 4,125 - 4,1475 . \quad (2.23)$$

Формула трапеций имеет точность, аналогичную точности формулы центральных прямоугольников.

Знак погрешности легко объяснить по геометрической иллюстрации применения формулы.

2.4. Метод Симпсона

На каждом элементарном отрезке подынтегральная функция $f(x)$ заменяется квадратичной параболой, построенной по трем точкам: концам элементарного отрезка (x_i, f_i) , (x_{i+1}, f_{i+1}) и его середине $(x_i + \frac{h}{2}, \tilde{f}_i)$.

Площадь полученной криволинейной трапеции служит оценкой элементарной площади S_i :

$$S_i \approx \frac{h}{6} \cdot (f_i + 4\tilde{f}_i + f_{i+1}) = \frac{h}{6} \cdot \left(f(x_i) + 4f\left(x_i + \frac{h}{2}\right) + f(x_{i+1}) \right). \quad (2.24)$$

Тогда значение интеграла

$$\begin{aligned} \Gamma^* &\approx \sum_{i=0}^{n-1} \frac{h}{6} (f_i + 4\tilde{f}_i + f_{i+1}) = \\ &= \frac{h}{6} (f_0 + 4\tilde{f}_0 + f_1 + f_1 + 4\tilde{f}_1 + f_2 + \dots + \\ &+ f_{n-2} + 4\tilde{f}_{n-2} + f_{n-1} + f_{n-1} + 4\tilde{f}_{n-1} + f_n). \end{aligned} \quad (2.25)$$

Добавим в скобки $-f_0 + f_0$, вынесем общий множитель за скобки:

$$\begin{aligned} \Gamma^* &\approx \frac{h}{3} \cdot \left[\frac{f_n - f_0}{2} + \sum_{i=0}^{n-1} (f_i + 2\tilde{f}_i) \right] = \\ &= \frac{h}{3} \cdot \left[\frac{f(b) - f(a)}{2} + \sum_{i=0}^{n-1} \left(f(a + ih) + 2f\left(a + ih + \frac{h}{2}\right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Формула Симпсона имеет высокую точность, так как погрешность метода $\delta_M = O(h^3)$.

Пример 2.3. Вычислить значение ранее рассмотренного интеграла:

$$I = \int_{0,5}^2 (x^2 + 1) dx, \quad (2.27)$$

при $n=2$, тогда $h=0,75$, по формуле Симпсона

$$\begin{aligned}
I_c &= h \cdot \left[\frac{f(b) - f(a)}{2} + \sum_{i=0}^{n-1} \left(f(a + i \cdot h) + 2 \cdot f\left(a + i \cdot h + \frac{h}{2}\right) \right) \right] = \\
&= \frac{0,75}{3} \cdot \left[\frac{f(2) - f(0,5)}{2} + \sum_{i=0}^1 \left(f(0,5 + i \cdot 0,75) + 2 \cdot f\left(0,5 + i \cdot 0,75 + 0,375\right) \right) \right] = \\
&= \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{(2^2 + 1) - (0,5^2 + 1)}{2} + f(0,5) + 2 \cdot f(0,875) + f(1,25) + 2 \cdot f(1,625) \right) = \\
&= \frac{1}{4} \cdot \left(\frac{5 - 1,25}{2} + (0,5^2 + 1) + 2 \cdot (0,875^2 + 1) + (1,25^2 + 1) + 2 \cdot (1,625^2 + 1) \right) = \\
&= \frac{1}{4} (1,875 + 1,25 + 3,53125 + 2,5625 + 7,28125) = \frac{16,5}{4} = 4,125 . \tag{2.28}
\end{aligned}$$

Погрешность расчета

$$\delta = 4,125 - 4,125 = 0. \tag{2.29}$$

Такой результат объясняется тем, что подынтегральная функция в примере является квадратичной параболой и замена ее параболой не вносит погрешности метода, а погрешность округления в расчётах отсутствует.

Рассмотренные формулы являются частным случаем формулы Ньютона-Котеса, полученной в общем виде при замене подынтегральной функции $f(x)$ полиномом k -й степени (при $k=1$ – формула трапеций, при $k=2$ – формула Симпсона).

Чем больше k , тем точнее вычисляется интеграл при одинаковом числе узлов n .

2.5. Выбор шага интегрирования

При вычислении значения определенного интеграла от функций, заданных аналитически, необходимо обеспечить требуемую точность расчета ε .

Точность вычисления можно повысить двумя способами:

- использовать более точную квадратурную формулу;
- увеличить количество узлов, соответственно уменьшить шаг интегрирования h .

На практике обычно используется формула Симпсона, а требуемая точность расчета достигается вторым из указанных выше способов.

Выполняется расчет с выбранным числом узлов n , затем выполняется расчет с удвоенным их числом. Если результаты отличаются более чем на требуемую точность, число узлов вновь удваивается. Расчет заканчивают, когда $|I_n - I_{2n}| \leq \varepsilon$, полагая, что $|I_{2n} - I^*| \leq \varepsilon$, т.е. последнее вычисленное приближенное значение интеграла отличается от точного значения не больше чем на заданную точность.

Такой способ называется *автоматическим выбором шага* интегрирования и легко реализуется на компьютере.

Начальный шаг интегрирования рекомендуется выбирать из соотношения

$$h = k\sqrt[k]{\varepsilon}, \quad (2.30)$$

где $k = 1$ для формул правых и левых прямоугольников;

$k = 2$ для формул трапеций и центральных прямоугольников;

$k = 3$ для формулы Симпсона.

Следует отметить, что погрешность решения включает погрешности метода δ_M и погрешность округления δ_O .

При увеличении числа узлов n δ_M уменьшается, но растет δ_O , т.к. увеличивается количество арифметических действий для решения задачи. Зависимость этих величин показана на рис.2.7.

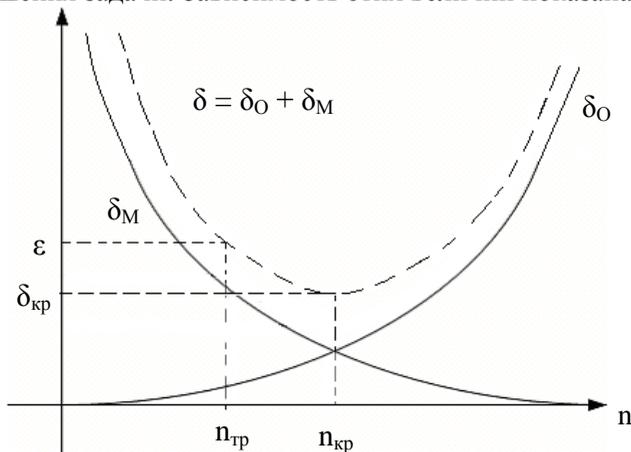


Рис. 2.7. Структура погрешности численного интегрирования

Из графика следует, что требуемую точность ε следует выбирать больше $\delta_{кр}$, иначе требуемая точность не может быть достигнута.

2.6. Метод Монте-Карло

В 1950-х годах метод использовался для расчётов при разработке водородной бомбы. Основные заслуги в развитии метода в это время принадлежат сотрудникам лабораторий ВВС США и корпорации RAND. Одними из первых метод Монте-Карло для расчёта ливней частиц применили советские физики А. А. Варфоломеев и И. А. Светлолобов.

В 1970-х годах в новой области математики – теории вычислительной сложности – было показано, что существует класс задач, сложность (количество вычислений, необходимых для получения точного ответа) которых растёт с размерностью задачи экспоненциально.

В настоящее время основные усилия исследователей направлены на создание эффективных алгоритмов различных физических, химических и социальных процессов для параллельных вычислительных систем.

Рассмотрим более подробно данный метод для вычисления определенных интегралов.

Предположим, необходимо взять интеграл от некоторой функции. Воспользуемся неформальным геометрическим описанием интеграла и будем понимать его как площадь под графиком этой функции.

Для определения этой площади можно воспользоваться одним из обычных численных методов интегрирования: разбить отрезок на подотрезки, подсчитать площадь под графиком функции на каждом из них и сложить.

Предположим, что для функции, представленной на рис. 2.8, достаточно разбиения на 25 отрезков и, следовательно, вычисления 25 значений функции.

Представим, что оперируем с n -мерной функцией. Тогда необходимо 25^n отрезков и столько же вычислений значения

функции. При размерности функции больше 10, задача становится очень большой.

Поскольку пространства большой размерности встречаются, в частности, в задачах теории струн, а также многих других физических задачах, где имеются системы со многими степенями свободы, необходимо иметь метод решения, вычислительная сложность которого бы не столь сильно зависела от размерности. Именно таким свойством обладает метод Монте-Карло.

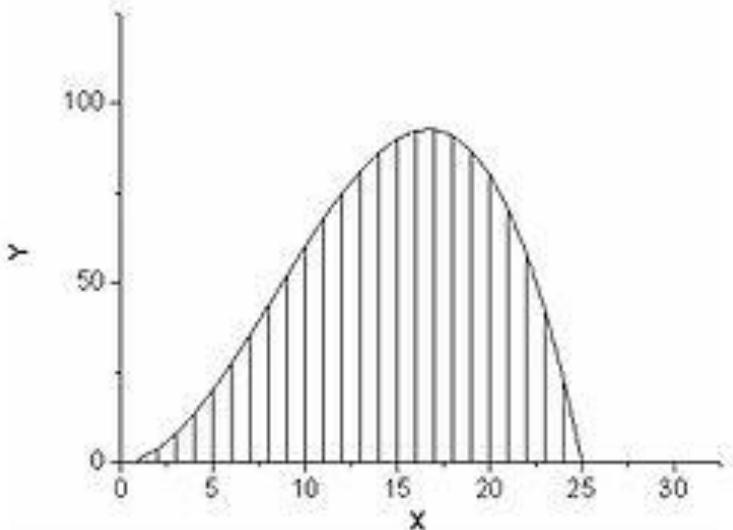


Рис.2.8. Численное интегрирование функции детерминистическим методом

Обычный алгоритм интегрирования методом Монте-Карло выглядит следующим образом.

Предположим, требуется вычислить определённый интеграл

$$\int_a^b f(x) dx, \quad (2.31)$$

Рассмотрим случайную величину u , равномерно распределённую на отрезке интегрирования $[a, b]$. Тогда

$f(u)$ также будет случайной величиной, причём её математическое ожидание выражается как

$$Ef(u) = \int_a^b f(x)\varphi(x)dx, \quad (2.32)$$

где $\varphi(x)$ — плотность распределения случайной величины u , равная

$$\frac{1}{b-a} \quad \text{на участке } [a, b]. \quad (2.33)$$

Таким образом, искомый интеграл

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)Ef(u). \quad (2.34)$$

Но математическое ожидание случайной величины $f(u)$ можно легко оценить, смоделировав эту случайную величину и посчитав выборочное среднее.

Например, бросаем N точек, равномерно распределённых на $[a, b]$; для каждой точки u_i вычисляем $f(u_i)$. Затем вычисляем выборочное среднее:

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(u_i). \quad (2.35)$$

В итоге получаем оценку интеграла:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^N f(u_i). \quad (2.36)$$

Точность оценки зависит только от количества точек N .

Этот метод имеет и геометрическую интерпретацию. Он очень похож на детерминистический метод, с той разницей, что вместо равномерного деления области интегрирования на небольшие интервалы и суммирования площадей получившихся «столбцов» область интегрирования забрасывается случайными точками, на каждой из которых строится такой же «столбец», определяем его ширину как $\frac{b-a}{N}$ и суммируем их площади.

Геометрический алгоритм интегрирования методом Монте-Карло представлен на рис. 2.9.

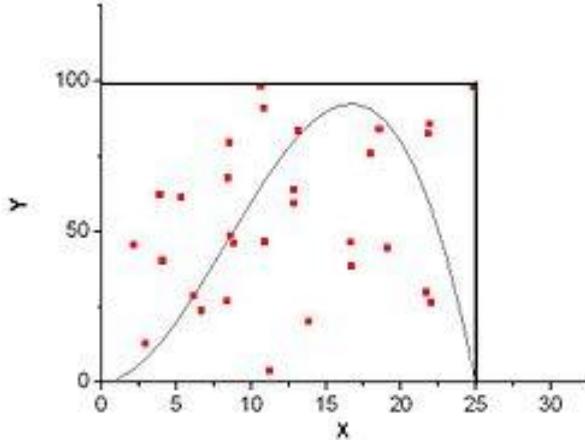


Рис.2.9. Численное интегрирование функции методом Монте-Карло

Для определения площади под графиком функции можно использовать следующий стохастический алгоритм:

1) Ограничить функцию прямоугольником (n -мерным параллелепипедом в случае многих измерений), площадь которого S_{par} можно вычислить; любая сторона прямоугольника содержит хотя бы 1 точку графика функции, но не пересекает его.

2) Заполнить прямоугольник (параллелепипед) некоторым количеством точек (N штук), координаты которых необходимо выбирать случайным образом.

3) Определить число точек (K штук), которые попадут под график функции.

4) Вычислить площадь области, ограниченной функцией и осями координат, по формуле

$$S = S_{par} \frac{K}{N}. \quad (2.37)$$

Для малого числа измерений интегрируемой функции производительность интегрирования методом Монте-Карло гораздо ниже, чем производительность детерминированных методов. Тем не менее в некоторых случаях, когда функция

задана неявно, а необходимо определить область, заданную в виде сложных неравенств, стохастический метод может оказаться более предпочтительным.

Лекция 3. Нелинейные уравнения и системы

3.1.Метод дихотомии

Решение уравнений – это одна из древнейших математических задач. Ещё в Древней Греции умели решать линейные и квадратные алгебраические уравнения. В эпоху Возрождения (XV век) Джироламо Кардано и его ученик Луиджи Феррари получили точные решения для алгебраических многочленов 3 и 4 степеней. Позднее много усилий было затрачено на получение точного решения многочленов 5-й степени и выше. Но только в 20-х годах XIX века было доказано, что решение алгебраического многочлена n -й степени

$$a_n x^n + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_0 = 0, \quad (3.1)$$

где $a_n \neq 0$,

при $n \geq 5$ нельзя выразить через коэффициенты с помощью арифметических действий и операций извлечения корня.

Известно, что алгебраический многочлен n -й степени имеет n корней, причём они могут быть вещественными и комплексными (теорема Гаусса).

Решение трансцендентных уравнений в явном виде также может быть получено в редких, простейших случаях. Трансцендентные уравнения, включающие алгебраические, тригонометрические, экспоненциальные функции от неизвестного x , как правило, имеют неопределённое число корней. Необходимость решения трансцендентных уравнений возникает, например, при расчёте устойчивости систем, расчете парожидкостного равновесия и т.п.

Достаточно распространённой задачей является также нахождение некоторых или всех решений системы из n нелинейных алгебраических или трансцендентных уравнений с n неизвестными.

Рассмотрим методы решения нелинейных уравнений с одним неизвестным.

Пусть задана непрерывная функция $f(x)$ и требуется найти корни уравнения

$$f(x)=0, \quad (3.2)$$

на всей числовой оси или на некотором интервале $a < x < b$.

Любое значение $x^* \in (a, b)$, удовлетворяющее условию $f(x^*) = 0$, называется **корнем уравнения**, а способ нахождения

этого значения x^* и есть **решение уравнения**.

Выделяют следующие методы решения уравнений:

– **прямые** (формула Виета для квадратного уравнения и Кардано для кубического и другие);

– **итерационные** – для решения любого уравнения.

Численное решение уравнения проводится в два этапа:

1) Отделение корней уравнения.

2) Уточнение интересующих корней с заданной точностью ϵ .

Метод дихотомии – простой и надежный метод поиска простого корня любой функции, устойчивый к погрешности округления. Даже если на отрезке есть несколько корней (нечетное количество), то будет найден один из них.

Недостатки метода: низкая скорость сходимости, не обобщается на систему уравнений.

Метод дихотомии нельзя использовать для уточнения не-простого корня – корень совпадает с точкой экстремума функции, т.к. в этом случае функция не изменяет свой знак в окрестности корня (рис. 3.1).

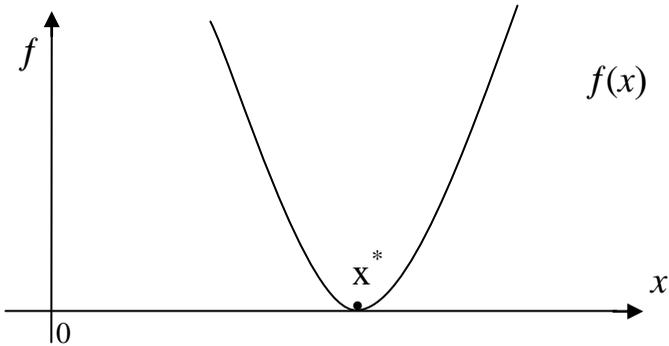


Рис.3.1. Непростой корень уравнения

Пример 3.1.

Требуется решить уравнение

$$x^3 + 2x = 1. \quad (3.3)$$

Сначала нужно отделить решения.

Удобно записать уравнение в виде $x^3 = 1 - 2x$ и построить графики двух элементарных функций: $f_1(x) = x^3$ и

$$f_2(x) = 1 - 2x. \quad (3.4)$$

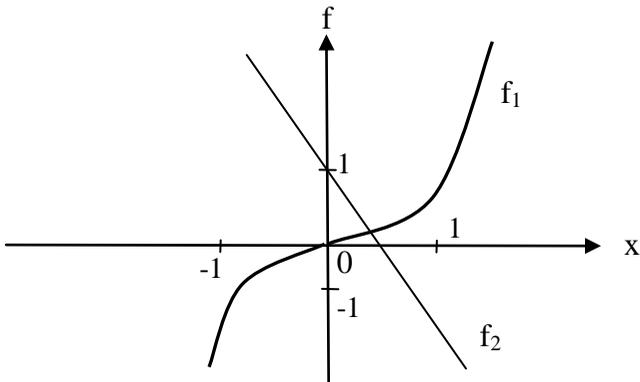


Рис. 3.2. Отделение корней уравнения $x^3 = 1 - 2x$

Из графика (рис.3.2) следует, что корень один:

$$x^* \in [0;1]. \quad (3.5)$$

Проверим наличие корня на отрезке:

$$f(a) = f(0) = 0^3 + 2 \cdot 0 = -1, \quad f(b) = f(1) = 1^3 + 2 \cdot 1 = 2. \quad (3.6)$$

Знаки на концах отрезка разные, следовательно, корень отделен верно.

Выполним несколько итераций уточнения корня.

$$1 \text{ итерация. Середина отрезка } x = (0+1)/2 = 0,5. \quad (3.7)$$

Значение функции в середине:

$$f(x) = f(0,5) = 0,5^3 + 2 \cdot 0,5 - 1 = 0,125 > 0. \quad (3.8)$$

Функция меняет свой знак на первой половине отрезка, следовательно, корень – на первой половине, поэтому отбросим вторую половину, переместив конец отрезка в середину:

$$x^* \in [0;0,5]. \quad (3.9)$$

$$2 \text{ итерация. Середина отрезка } x = (0+0,5)/2 = 0,25. \quad (3.10)$$

Значение функции в середине:

$$f(x) = f(0,25) = 0,25^3 + 2 \cdot 0,25 - 1 = 0,015625 - 0,5 = -0,48437. \quad (3.11)$$

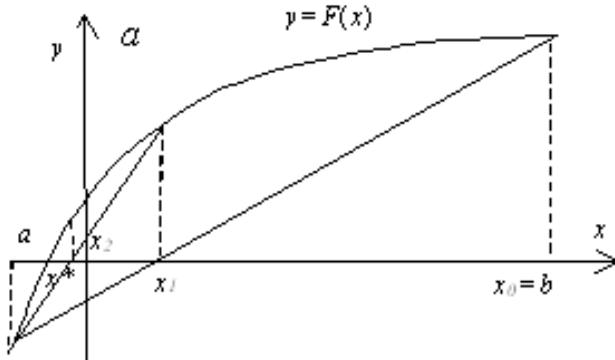
Функция не меняет свой знак на первой половине отрезка, поэтому отбросим ее: $x^* \in [0,25;0,5]$. (3.12)

Вычисления следует продолжить до достижения требуемой точности. Например, если $\varepsilon = 0,001$, то потребуется не менее 10 итераций:

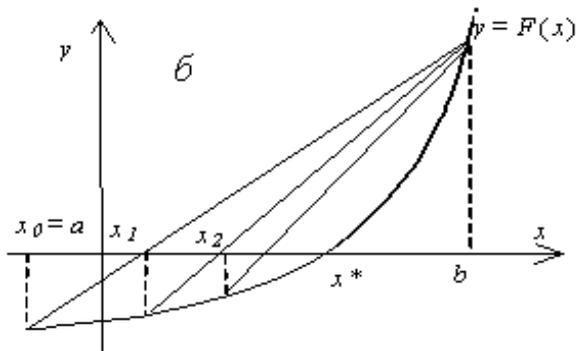
$$n = \frac{\ln \frac{b-a}{\varepsilon}}{\ln 2} = \frac{\ln \frac{1-0}{0,001}}{\ln 2} = \frac{\ln 1000}{\ln 2} \approx 9,96. \quad (3.13)$$

3.2. Метод хорд (ложного положения)

В этом методе кривая $f(x)$ заменяется прямой линией – хордой, стягивающей точки $(a, f(a))$ и $(b, f(b))$. В зависимости от знака выражения $f(a) f'(a)$ метод хорд имеет два варианта, изображенных на рис. 3.3,а,б.



a)



б)

Рис. 3.3. Метод хорд для $F(a)F''(a) > 0$ (а),
метод хорд для $F(a)F''(a) < 0$ (б)

Пусть $f(a)f''(a) > 0$ (рис. 3.3,а). Тогда $x_0 = b$, точка a будет оставаться неподвижной. Следующее приближение x_1 находим как точку пересечения хорды, соединяющей точки $(a, f(a))$ и $(x_0, f(x_0))$ с осью x . Уравнение хорды

$$y = f(a) + \frac{f(x_0) - f(a)}{x_0 - a}(x - a). \quad (3.14)$$

Тогда точка пересечения хорды с осью x

$$x_1 = a - \frac{f(a)(x_0 - a)}{f(x_0) - f(a)}. \quad (3.15)$$

Пусть теперь $f'(a)f''(a) < 0$ (рис. 3.3,б). Тогда $x_0 = a$, точка b неподвижна. Проведем хорду, соединяющую точки $(b, f(b))$ и $(x_0, f(x_0))$.

$$y = f(x_0) + \frac{f(b) - f(x_0)}{b - x_0}(x - x_0). \quad (3.16)$$

Вычисляем точку пересечения хорды с осью x :

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)(b - x_0)}{f(b) - f(x_0)}. \quad (3.17)$$

На следующей итерации в качестве x_0 надо взять вычисленное значение x_1 .

Таким образом, имеем следующую последовательность вычислений:

1. Если $f'(a)f''(a) > 0$, то $x_0 = b$ и

$$x_{k+1} = a - \frac{f(a)(x_k - a)}{f(x_k) - f(a)}. \quad (3.18)$$

2. Если же $f'(a)f''(a) < 0$, то $x_0 = a$ и

$$x_{k+1} - x_k = \frac{f(x_k)(b - x_k)}{f(b) - f(x_k)}. \quad (3.19)$$

Окончание итерационного цикла в этом методе происходит по условию малости невязки уравнения: $|f(x_1)| < \varepsilon$ или

$$|x_{i+1} - x_i| < \varepsilon. \quad (3.20)$$

3.3. Метод хорд с итерационной формулой

Рассмотрим первые три итерации метода хорд. Функция $f(x)$ представлена на рисунке. Проводимые хорды представлены отрезками (рис. 3.4).

Иногда методом секущих называют метод с итерационной формулой:

$$x_{i+1} = x_i - \frac{f(x_i)(x_i - x_0)}{f(x_i) - f(x_0)}. \quad (3.21)$$

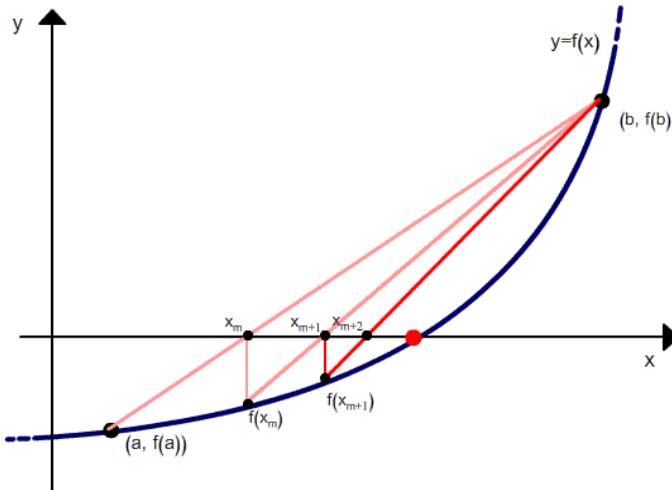


Рис.3.4. Метод хорд с итерационной формулой

Этот метод можно считать разновидностью метода простой итерации, и он имеет меньшую скорость сходимости.

Рассмотрим критерий и скорость сходимости метода хорд.

Если $f(x)$ — дважды непрерывно дифференцируемая функция и знак $f''(x)$ сохраняется на рассматриваемом промежутке, то полученные приближения будут сходиться к корню монотонно. Если корень ξ уравнения $f(\xi) = 0$ находится

на отрезке $[a, b]$, производные $f'(x)$ и $f''(x)$ на этом промежутке непрерывны, сохраняют постоянные знаки и

$$f''(b)f(b) > 0, \quad (3.22)$$

то можно доказать, что погрешность приближенного решения стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$, то есть метод сходится и сходится со скоростью геометрической прогрессии (при этом говорят, что он имеет линейную скорость сходимости).

3.4. Метод отделения корней

Отделение корней – это процедура определения наличия корней, их количества и нахождения для каждого из корней достаточно малого отрезка $[a, b]$, которому он принадлежит.

На первом этапе определяется число корней, их тип, а также интервал, в котором находятся эти корни.

В инженерных расчетах, как правило, необходимо определять только вещественные корни. Задача отделения вещественных корней решается *аналитическими* и *графическими методами*.

Аналитические методы основаны на функциональном анализе.

Для алгебраического многочлена n -й степени (полинома) с действительными коэффициентами вида

$$P_n(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \dots + a_1 x + a_0 = 0, \quad (a_n > 0) \quad (3.23)$$

верхняя граница положительных действительных корней R_B^+ определяется по формуле Лагранжа (Маклорена):

$$R_B^+ = 1 + k \sqrt{\frac{B}{a_n}}, \quad B = \max_{a_i < 0} |a_i|, \quad (3.24)$$

где $k \geq 1$ – номер первого из отрицательных коэффициентов полинома;

B – максимальный по модулю отрицательный коэффициент.

Нижнюю границу положительных действительных корней R_H^+ можно определить из вспомогательного уравнения

$$P'_n(x) = x^n \cdot P_n\left(\frac{1}{x}\right). \quad (3.25)$$

Если для этого уравнения по формуле Лагранжа верхняя граница равна R_1 , то

$$R_H^+ = \frac{1}{R_1}. \quad (3.26)$$

Тогда все положительные корни многочлена лежат в интервале

$$R_H^+ \leq x^+ \leq R_B^+. \quad (3.27)$$

Интервал отрицательных действительных корней многочлена определяется с использованием следующих вспомогательных функций:

$$P_n^2(x) = P_n(-x), \quad P_n^3(x) = x^n \cdot P_n\left(-\frac{1}{x}\right), \quad (3.28)$$

$$R_H^- \leq x^- \leq R_B^-, \quad R_H^- = \frac{1}{R_3}, \quad R_B^- = R_2^2. \quad (3.29)$$

Пример 3.2.

Рассмотрим пример отделения корней с использованием этого аналитического метода.

Методом Лагранжа определим границы положительных и отрицательных корней многочлена.

$$3x^8 - 5x^7 - 6x^3 - x - 9 = 0, \quad (3.30)$$

$$k = 1, \quad B = |-9|, \quad a_n = 3, \quad (3.31)$$

$$R_B^+ = 1 + \sqrt[3]{\frac{9}{3}} = 4, \quad (3.31)$$

$$P'_n(x) = 9x^8 + x^7 + 6x^5 + 5x - 3 = 0, \quad (3.32)$$

$$R_H^+ = \frac{1}{R'} = \frac{1}{1 + \sqrt[8]{\frac{3}{9}}} = \frac{1}{1,87} = 0,5, \quad (3.33)$$

$$k = 8, B = 3, a_n = 9.$$

Отсюда границы положительных корней

$$0,5 \leq x^+ \leq 4, \quad (3.34)$$

$$P_n^2 = P_n(-x) = 3x^8 + 5x^7 + 6x^3 + x - 9 = 0, \quad (3.35)$$

$$R_B^- = 1 + \sqrt[8]{\frac{9}{3}} = 1 + \sqrt[8]{3} \approx 2,0, \quad (3.36)$$

$$R_H^3(x) = x^n \cdot P_n \cdot \left(-\frac{1}{x}\right) = 9x^8 - x^7 - 6x^5 - 5x - 3 = 0, \quad (3.37)$$

$$k = 1, B = 6, a_n = 9,$$

$$R_H^- = \frac{1}{R_4} = \frac{1}{1 + \frac{6}{9}} = \frac{1}{\frac{5}{3}} = \frac{3}{5} = 0,6. \quad (3.39)$$

Следовательно, границы отрицательных корней

$$-2 \leq x^- \leq -0,6. \quad (3.39)$$

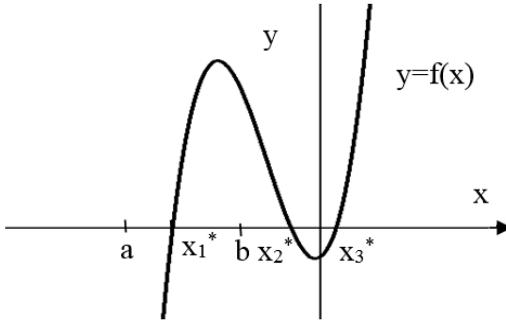
Формула Лагранжа позволяет оценить интервал, в котором находятся все действительные корни, положительные или отрицательные. Поэтому для определения расположения каждого корня необходимо проводить дополнительные исследования.

Для трансцендентных уравнений не существует общего метода оценки интервала, в котором находятся корни. Для этих уравнений оцениваются значения функции в особых точках: разрыва, экстремума, перегиба и других.

На практике получил большее распространение **графический метод приближённой оценки вещественных корней**. Для этих целей строится график функции по вычисленным её значениям.

Графически корни можно отделить двумя способами:

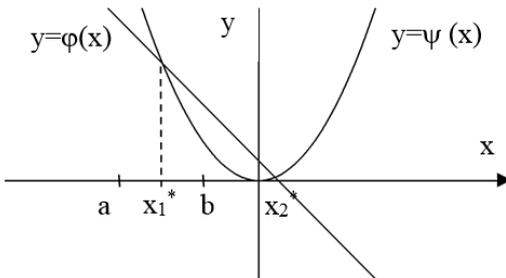
1. Построить график функции $y = f(x)$ и определить координаты пересечений с осью абсцисс – это приближенные значения корней уравнения (рис.3.5).



На графике 3 корня.
Первый корень
 $x^* \in [a, b]$

Рис. 3.5. Отделение корней на графике $f(x)$

2. Преобразовать $f(x)=0$ к виду $\varphi(x) = \psi(x)$, где $\varphi(x)$ и $\psi(x)$ – элементарные функции, и определить абсциссу пересечений графиков этих функций (рис.3.6).



На графике 2
корня.
Первый корень
 $x_1^* \in [a, b]$

Рис. 3.6. Отделение корней по графикам функций $\varphi(x)$ и $\psi(x)$

3.5. Метод Ньютона (касательных)

Постановка задачи:

Дано нелинейное уравнение $f(x)=0$. (3.40)

Корень отделен $x^* \in [a;b]$. (3.41)

Требуется уточнить корень с точностью ε .

Метод основан на стратегии постепенного уточнения корня. Формулу уточнения можно получить из геометрической иллюстрации идеи метода (рис.3.7).

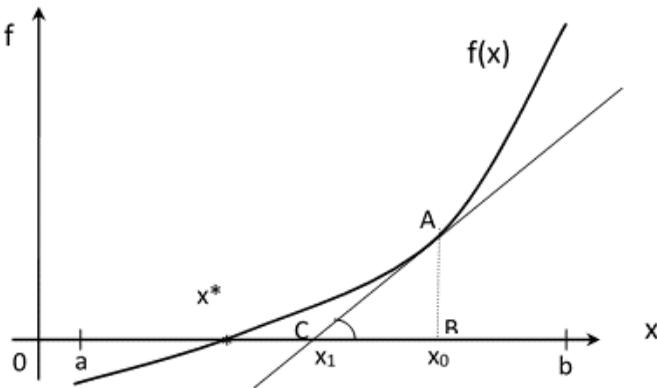


Рис. 3.7. Геометрическая иллюстрация метода Ньютона

На отрезке существования корня выбирается начальное приближение x_0 . К кривой $f(x)$ в точке A с координатами $(x_0, f(x_0))$ проводится касательная. Абсцисса x_1 точки пересечения этой касательной с осью OX является новым приближением корня.

Из рисунка следует, что $x_1 = x_0 - CB$. (3.42)

Из $\triangle ABC$ $CD = \frac{AB}{\operatorname{tg} \angle ACB}$. (3.43)

Но $\operatorname{tg} \angle ACB = f'(x_0)$, $AB = f(x_0)$. (3.44)

$$\text{Следовательно, } x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} . \quad (3.45)$$

Аналогично для i -го приближения можно записать формулу итерационного процесса для метода Ньютона:

$$x_i = x_{i-1} - \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})}, i = 1, 2, \dots, \quad (3.46)$$

где $x_0 \in [a; b]$.

$$\text{Условие окончания расчета: } |\delta| \leq \varepsilon, \quad (3.47)$$

$$\text{где } \delta = x_{i-1} - x_i = \frac{f(x_{i-1})}{f'(x_{i-1})} - \text{корректирующее} \quad (3.48)$$

приращение или поправка.

Условие сходимости итерационного процесса:

$$|f(x) \cdot f''(x)| < (f'(x))^2 \forall x \in [a, b] . \quad (3.49)$$

Если на отрезке существования корня знаки $f'(x)$ и $f''(x)$ не изменяются, то начальное приближение, обеспечивающее сходимость, нужно выбрать из условия

$$f(x_0) \cdot f''(x_0) > 0, \quad x_0 \in [a; b], \quad (3.50)$$

т.е. в точке начального приближения знаки функций и ее второй производной должны совпадать (рис.3.8).

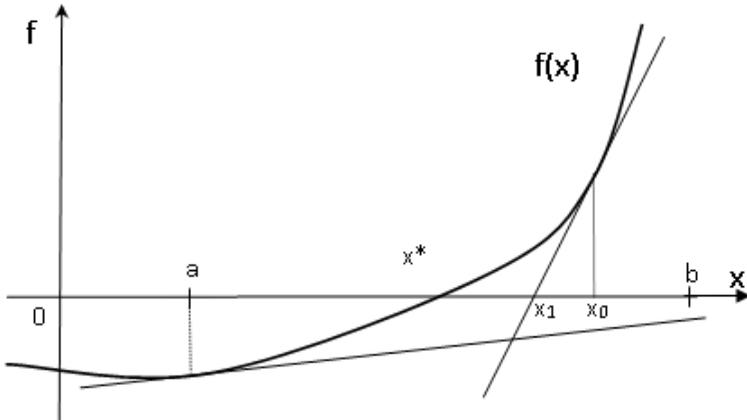


Рис. 3.8. Геометрическая иллюстрация выбора начального приближения: график $f(x)$ вогнутый, $f''(x) > 0$, тогда $x_0=b$, т.к. $f(b)>0$

Если же выбрать $x_0=a$, то итерационный процесс будет сходиться медленнее или даже расходиться (рис.3.9).

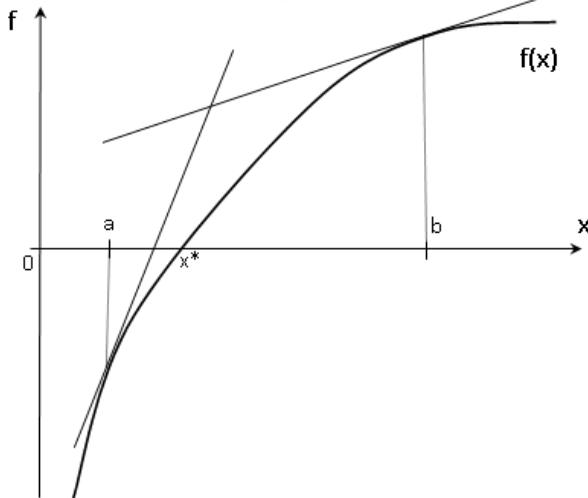


Рис. 3.9. Геометрическая иллюстрация выбора начального приближения: график $f(x)$ выпуклый, $f''(x) < 0$, тогда $x_0=a$, т.к. $f(a)<0$

Геометрическая иллюстрация выбора начального приближения: график $f(x)$ выпуклый, $f''(x) < 0$, тогда $x_0=a$, т.к.

$$f(a) < 0. \quad (3.51)$$

В методе Ньютона в отличие от ранее рассмотренных методов используются свойства функции в виде значения производной, что значительно ускоряет итерационный процесс. При этом чем больше значение модуля производной в окрестности корня (чем круче график функции), тем быстрее сходимость.

Достоинства метода: высокая скорость сходимости; обобщается на системы уравнений.

Недостатки: метод сложный, т.к. требуется вычисление производных; сильная зависимость сходимости от вида функции и выбора начального приближения.

Пример 3.3.

Методом Ньютона уточнить корни уравнения $x^3 = 1 - 2x$ с точностью $\varepsilon = 0,001$. Корень отделён $x^* \in [0,1]$. (3.52)

Решение:

Сначала необходимо выбрать начальное приближение.

$$\begin{aligned} f(x) &= x^3 + 2x - 1, \\ f'(x) &= 3x^2 + 2, \\ f''(x) &= 6x. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Производные имеют постоянный знак на отрезке (0,1).

Знак второй производной на отрезке положительный, следовательно,

$$x_0 = b = 1, \text{ т.к. } f(b) = f(1) = 1^3 + 2 \cdot 1 - 1 = 2 > 0. \quad (3.54)$$

Вычислим несколько приближений:

$$x_1 = x_0 - \frac{f(x_0)}{f'(x_0)} = 1 - \frac{1^3 + 2 \cdot 1 - 1}{3 \cdot 1^2 + 2} = 1 - \frac{2}{5} = 0,6; \quad (3.55)$$

$$x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)} = 0,6 - \frac{0,6^3 + 2 \cdot 0,6 - 1}{3 \cdot 0,6^2 + 2} = \quad (3.56)$$

$$= 0,6 - 0,135065 = 0,464935;$$

$$x_3 = 0,464935 - 0,011468 = 0,453467; \quad (3.57)$$

$$x_4 = 0,453463 - 0,0000695 = 0,453398. \quad (3.58)$$

Решение получено за 4 итерации, так как поправка стала меньше заданной точности: $0,0000695 < \varepsilon$. (3.59)

Лекция 4. Решение систем линейных уравнений

4.1. Метод Гаусса

Идея метода Гаусса состоит в последовательном исключении неизвестных. Алгоритм решения системы уравнений этим методом проследим на примере.

Пример 4.1.

$$\begin{cases} 6x_1 - 3x_2 - x_3 = 15, \\ x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 6, \\ -3x_1 + x_2 + 4x_3 = -17. \end{cases}$$

Выбирается ведущее уравнение с коэффициентом при x_1 , равным 1. В нашем примере ведущим уравнением будет второе. Систему лучше переписать, поставив это уравнение на первое место:

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 6, \\ 6x_1 - 3x_2 - x_3 = 15, \\ -3x_1 + x_2 + 4x_3 = -17. \end{cases}$$

Умножаем первое уравнение на 6 и вычитаем из полученного второе, чтобы исключить из второго неизвестное x_1 . Первое уравнение записываем, а на место второго – результат вычитания.

Затем первое уравнение умножаем на 3 и складываем с третьим уравнением. Тогда получаем систему

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 6, \\ 15x_2 - 17x_3 = 21, \\ 7x_2 - 5x_3 = 1. \end{cases}$$

Или же первое уравнение переписываем без изменения, а второе умножаем на 7 и вычитаем из него третье уравнение, умноженное на 15, чтобы избавиться от x_2 в третьем уравнении.

При этом второе записываем без изменения, на месте третьего – результат вычитания. Тогда

$$\begin{cases} x_1 + 2x_2 - 3x_3 = 6, \\ 15x_2 - 17x_3 = 21, \\ -44x_3 = 132. \end{cases}$$

Из третьего следует $x_3 = -3$, подставим его во второе, получим $x_2 = -2$. Далее подставим найденные x_2 и x_3 в первое уравнение, получим $x_1 = 1$.

Решение системы: $x_1 = 1$, $x_2 = -2$, $x_3 = -3$.

Примечание: если система уравнений не содержит уравнения с коэффициентом 1 при x_1 , тогда исключение x_1 из второго и третьего достигается умножением сначала первого на коэффициент второго, а затем второго на коэффициент первого. Затем умножаем первое на коэффициент третьего, а третье – на коэффициент первого. Таким образом, при вычитании исключаем x_1 .

4.2. Матричный метод

Запишем систему линейных уравнений с 3 неизвестными:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3. \end{cases} \quad (4.1)$$

Составим матрицу из коэффициентов при неизвестных:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}.$$

Введем в рассмотрение матрицы-столбцы для неизвестных и свободных членов:

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}; B = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ b_3 \end{pmatrix}.$$

Тогда систему (4.1) можно переписать в матричной форме:
 $AX=B$.

Умножив это уравнение на A^{-1} слева, получим
 $A^{-1} \cdot AX = A^{-1} \cdot B$, откуда $EX = A^{-1} \cdot B$ или $X = A^{-1} \cdot B$.

Следовательно, матрица-решение X находится как произведение A^{-1} и B .

Пример 4.2.

Решить систему уравнений матричным методом:

$$\begin{cases} 2x_1 + 5x_2 + 7x_3 = 16, \\ 6x_1 + 3x_2 + 4x_3 = 14, \\ 5x_1 - 2x_2 - 3x_3 = -1. \end{cases}$$

Решение: определитель матрицы

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 5 & 7 \\ 6 & 3 & 4 \\ 5 & -2 & -3 \end{pmatrix},$$

$\Delta = -1$, значит, существует обратная матрица A^{-1} .

Матрица-столбец при неизвестных выглядит следующим образом:

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}.$$

Матрица-столбец из свободных членов выглядит следующим образом:

$$B = \begin{pmatrix} 16 \\ 14 \\ -1 \end{pmatrix}.$$

Тогда решение запишется в виде

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} &= A^{-1} \begin{pmatrix} 16 \\ 14 \\ -1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ -38 & 41 & -34 \\ 27 & -29 & 24 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 16 \\ 14 \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 16 - 14 - 1 \\ -608 + 574 + 34 \\ 432 - 406 - 24 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 2 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Откуда следует: $x_1 = 1$; $x_2 = 0$; $x_3 = 2$.

4.3. Вычисление определителей второго и третьего порядков

Число $(a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21})$ называется определителем второго порядка и обозначается символом

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{vmatrix}.$$

Определитель второго порядка содержит две строки и два столбца. Числа a_{11} , a_{12} , a_{21} , a_{22} называются элементами определителя. Диагональ определителя, на которой расположены числа a_{11} , a_{22} , является главной, а элементы a_{12} , a_{21} составляют побочную диагональ.

Определитель 3-го порядка содержит три строки и три столбца:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}.$$

Для вычисления определителя третьего порядка существует несколько способов.

Рассмотрим метод вычисления определителя разложением по элементам первой строки.

Введем понятие минора и алгебраического дополнения.

Минором некоторого элемента определителя называется определитель, полученный из данного вычеркиванием той строки и того столбца, в которых этот элемент расположен. Обозначается M_{ij} (i – номер строки, j – номер столбца).

Например, минором элемента a_{12} является определитель

$$\begin{vmatrix} a_{21} & a_{23} \\ a_{31} & a_{33} \end{vmatrix}.$$

Алгебраическим дополнением данного элемента определителя называется его минор, умноженный на $(-1)^{i+j}$. Алгебраические дополнения обозначаются буквами A_{ij} , и тогда $A_y = (-1)^{i+j} M_y$.

Определитель вычисляется так:

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix} = a_{11}A_{11} + a_{12}A_{12} + a_{13}A_{13}.$$

Так же можно разложить определитель по любой строке или столбцу.

Изложенный метод применим к вычислению определителей 4-го и т.д. порядков.

Пример 4.3.

Вычислить определитель разложением по элементам первой строки:

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 2 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & 4 \end{vmatrix}.$$

Решение:

Элементы первой строки

$$a_{11} = 1, a_{12} = 2, a_{13} = -2.$$

$$A_{11} = (-1)^{1+1}; M_{11} = \begin{vmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 4 \end{vmatrix} = 4+1=5.$$

M_{11} получили, вычеркнув первую строку и первый столбец.

$$A_{12} = (-1)^{1+2}. M_{12} = - \begin{vmatrix} 2 & -1 \\ 3 & 4 \end{vmatrix} = - (8+3) = -11.$$

M_{12} получили, вычеркнув первую строку и второй столбец.

$$A_{13} = (-1)^{1+3}. M_{13} = \begin{vmatrix} 2 & 1 \\ 3 & 1 \end{vmatrix} = 2-3 = -1.$$

M_{13} получили, вычеркнув первую строку и третий столбец.
Окончательно

$$\begin{vmatrix} 1 & 2 & -2 \\ 2 & 1 & -1 \\ 3 & 1 & 4 \end{vmatrix} = 1 \cdot 5 + 2 \cdot (-11) - 2 \cdot (-1) = -15.$$

4.4. Решение системы линейных уравнений с тремя неизвестными методом Крамера

Система линейных уравнений

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 = b_1, \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 = b_2, \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 = b_3. \end{cases}$$

Определители

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}, \quad \Delta_1 = \begin{vmatrix} b_1 & a_{12} & a_{13} \\ b_2 & a_{22} & a_{23} \\ b_3 & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix},$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} a_{11} & b_1 & a_{13} \\ a_{21} & b_2 & a_{23} \\ a_{31} & b_3 & a_{33} \end{vmatrix}, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & b_1 \\ a_{21} & a_{22} & b_2 \\ a_{31} & a_{32} & b_3 \end{vmatrix}.$$

Решение:

$$x_1 = \frac{\Delta_1}{\Delta}, \quad x_2 = \frac{\Delta_2}{\Delta}, \quad x_3 = \frac{\Delta_3}{\Delta}.$$

Пример 4.4.

$$\begin{cases} 2x_1 + 5x_2 + 4x_3 = 30, \\ x_1 + 3x_2 + 2x_3 = 150, \\ 2x_1 + 10x_2 + 9x_3 = 110. \end{cases}$$

Решение:

Определители:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 2 & 5 & 4 \\ 1 & 3 & 2 \\ 2 & 10 & 9 \end{vmatrix} = 5, \quad \Delta_1 = \begin{vmatrix} 30 & 5 & 4 \\ 150 & 3 & 2 \\ 110 & 10 & 9 \end{vmatrix} = -760,$$

$$\Delta_2 = \begin{vmatrix} 2 & 30 & 4 \\ 1 & 150 & 2 \\ 2 & 110 & 9 \end{vmatrix} = 1350, \quad \Delta_3 = \begin{vmatrix} 2 & 5 & 30 \\ 1 & 3 & 150 \\ 2 & 10 & 110 \end{vmatrix} = -1270.$$

$$x_1 = -\frac{760}{5} = -152, \quad x_2 = \frac{1350}{5} = 270, \quad x_3 = -\frac{1270}{5} = -254.$$

4.5. Метод простой итерации или метод Якоби

Требуется решить систему линейных уравнений, которая в матричном виде записывается как

$$A\bar{x} = \bar{f}, \text{ где}$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{m1} & a_{m2} & \dots & a_{mm} \end{pmatrix}, \bar{f} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_{m-1} \\ f_m \end{pmatrix}, \bar{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_{m-1} \\ x_m \end{pmatrix}.$$

Предположим, что диагональные элементы матриц A исходной системы не равны 0 ($a_{ii} \neq 0, i = 1, 2, \dots, n$). Разрешим первое уравнение системы относительно x_1 , второе – относительно x_2 и т.д. Получим следующую эквивалентную систему, записанную в скалярном виде:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{1}{a_{11}} (f_1 - (a_{12}x_2 + a_{13}x_3 + \dots + a_{1m}x_m)), \\ x_2 &= \frac{1}{a_{22}} (f_2 - (a_{21}x_1 + a_{23}x_3 + \dots + a_{2m}x_m)), \\ &\dots \dots \dots \\ x_m &= \frac{1}{a_{mm}} (f_m - (a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \dots + a_{m,m-1}x_{m-1})). \end{aligned} \quad (4.2)$$

Теперь, задав нулевое приближение $x_i^{(0)}$, по рекуррентным соотношениям (4.2) можем выполнять итерационный процесс, а именно:

$$\begin{aligned} x_1^{(1)} &= \frac{1}{a_{11}} (f_1 - (a_{12}x_2^{(0)} + a_{13}x_3^{(0)} + \dots + a_{1m}x_m^{(0)})), \\ x_2^{(1)} &= \frac{1}{a_{22}} (f_2 - (a_{21}x_1^{(0)} + a_{23}x_3^{(0)} + \dots + a_{2m}x_m^{(0)})), \\ &\dots \dots \dots \\ x_m^{(1)} &= \frac{1}{a_{mm}} (f_m - (a_{m1}x_1^{(0)} + a_{m2}x_2^{(0)} + \dots + a_{m,m-1}x_{m-1}^{(0)})). \end{aligned} \quad (4.3)$$

Аналогично находятся следующие приближения $x_i^{(2)}$, где в (4.3) вместо $x_i^{(0)}$ необходимо подставить $x_i^{(1)}$.

Или в общем случае

$$\begin{aligned} x_1^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{11}} \left(f_1 - (a_{12}x_2^{(k)} + a_{13}x_3^{(k)} + \dots + a_{1m}x_m^{(k)}) \right), \\ x_2^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{22}} \left(f_2 - (a_{21}x_1^{(k)} + a_{23}x_3^{(k)} + \dots + a_{2m}x_m^{(k)}) \right), \\ &\dots\dots\dots \\ x_m^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{mm}} \left(f_m - (a_{m1}x_1^{(k)} + a_{m2}x_2^{(k)} + \dots + a_{m,m-1}x_{m-1}^{(k)}) \right), \\ \text{или } x_i^{(k+1)} &= \frac{1}{a_{ii}} \left(f_i - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^m c_{ij}x_j^{(k)} \right). \end{aligned} \quad (4.4)$$

Условие окончания итерационного процесса

$$\max_i |x_i^{(k+1)} - x_i^{(k)}| < \varepsilon.$$

Достаточное условие сходимости: если выполнено условие диагонального преобладания, т.е.

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^n |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (4.5)$$

то итерационный процесс (4.4) сходится при любом выборе начального приближения. Если исходная система уравнений не удовлетворяет условию сходимости, то ее приводят к виду с диагональным преобладанием.

Выбор начального приближения влияет на количество итераций, необходимых для получения приближенного решения. Наиболее часто в качестве начального приближения берут или $x_i^{(0)} = \beta_i = \frac{f_i}{a_{ii}}$ или $x_i^{(0)} = 0$.

Замечание. Указанное выше условие сходимости является достаточным: если оно выполняется, то процесс сходится. Однако процесс может сходиться и при отсутствии диагонального преобладания, а может и не сойтись.

Пример 4.5.

Решить систему линейных уравнений с точностью $\varepsilon = 0.01$:

$$\begin{cases} 8x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 10, \\ 3x_1 + 5x_2 + x_3 = 5, \\ 3x_1 - 2x_2 + 10x_3 = 4. \end{cases}$$

Решение:

$$A = \begin{pmatrix} 8 & 4 & 2 \\ 3 & 5 & 1 \\ 3 & -2 & 10 \end{pmatrix}; \vec{f} = \begin{pmatrix} 10 \\ 5 \\ 4 \end{pmatrix}; \vec{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix}.$$

Вычисление прямыми методами, например обратной матрицей, даёт следующее решение:

$$x_1 = 1.308; x_2 = 0.346; x_3 = 0.158.$$

Найдем решение методом простой итерации. Проверяем условие диагонального преобладания: $|8| > |4| + |2|$, $|5| > |3| + |1|$, $|10| > |-2| + |3|$.

Приводим систему уравнений к виду (4.4):

$$\begin{cases} x_1 = -0.5x_2 - 0.25x_3 + 1.25, \\ x_2 = -0.6x_1 - 0.2x_3 + 1, \\ x_3 = -0.3x_1 + 0.2x_2 + 0.4, \end{cases}$$

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -0.5x_2^{(k)} - 0.25x_3^{(k)} + 1.25, \\ x_2^{(k+1)} = -0.6x_1^{(k)} - 0.2x_3^{(k)} + 1, \\ x_3^{(k+1)} = -0.3x_1^{(k)} + 0.2x_2^{(k)} + 0.4, \end{cases}$$

Начальное приближение $x_i^{(0)} = 0$. Дальнейшие вычисления оформим в виде таблицы:

k	x ₁	x ₂	x ₃	Точность
0	0	0	0	
1	1.250	1.000	0.400	1.2500
2	0.650	0.170	0.225	0.8300
3	1.109	0.565	0.239	0.4588
			
4	0.908	0.287	0.180	0.2781
5	1.061	0.419	0.185	0.1537
6	0.994	0.326	0.165	0.0931
7	1.046	0.370	0.167	0.0515
8	1.023	0.594	0.160	0.2235
9	0.913	0.582	0.212	0.1101
10	0.906	0.505	0.242	0.0764
11	0.937	0.495	0.229	0.0305
12	0.945	0.516	0.218	0.0210
			
13	0.937	0.523	0.220	0.0077

Здесь $x_1^{(1)} = 1.25, x_2^{(1)} = 1, x_3^{(1)} = 0.4$.

$$\max \begin{pmatrix} |x_1^{(1)} - x_1^{(0)}| \\ |x_2^{(1)} - x_2^{(0)}| \\ |x_3^{(1)} - x_3^{(0)}| \end{pmatrix} = \max \begin{pmatrix} 1.25 \\ 1 \\ 0.4 \end{pmatrix} = 1.25 > \varepsilon = 0.01.$$

$$x_1^{(2)} = -0.5 \cdot 1 - 0.25 \cdot 0.4 + 1.25 = 0.65,$$

$$x_2^{(2)} = -0.6 \cdot 1.25 - 0.2 \cdot 0.4 + 1 = 0.17,$$

$$x_3^{(2)} = -0.3 \cdot 1.25 + 0.2 \cdot 1 + 0.4 = 0.225.$$

$$\max \begin{pmatrix} |x_1^{(2)} - x_1^{(1)}| \\ |x_2^{(2)} - x_2^{(1)}| \\ |x_3^{(2)} - x_3^{(1)}| \end{pmatrix} = \max \begin{pmatrix} 0.6 \\ 0.83 \\ 0.175 \end{pmatrix} > \varepsilon.$$

$$x_1^{(3)} = -0.5 \cdot 0.17 - 0.25 \cdot 0.225 + 1.25 = 1.109,$$

$$x_2^{(3)} = -0.6 \cdot 0.65 - 0.2 \cdot 0.225 + 1 = 0.565,$$

$$x_3^{(3)} = -0.3 \cdot 0.65 + 0.2 \cdot 0.104 = 0.239.$$

$$\max \begin{pmatrix} |x_1^{(2)} - x_1^{(3)}| \\ |x_2^{(2)} - x_2^{(3)}| \\ |x_3^{(2)} - x_3^{(3)}| \end{pmatrix} = \max \begin{pmatrix} 0.459 \\ 0.395 \\ 0.014 \end{pmatrix} > \varepsilon.$$

И так далее, пока не получим в последнем столбце величину, меньшую 0.01, что произойдет на 13-й итерации.

Следовательно, приближенное решение имеет вид $x_1 = 0.937$, $x_2 = 0.523$; $x_3 = 0.22$.

4.7. Метод Гаусса – Зейделя

Расчетные формулы имеют вид:

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} \left[f_i - \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} \right],$$

т.е. для подсчета i -й компоненты $(k+1)$ -го приближения к искомому вектору используются уже вычисленные на $(k+1)$ -м шаге новые значения первых $i-1$ компонент.

Подробные формулы имеют вид

$$x_1^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} (f_1 - a_{12} x_2^{(k)} - a_{13} x_3^{(k)} - \dots - a_{1m} x_m^{(k)}),$$

$$x_2^{(k+1)} = \frac{1}{a_{22}} (f_2 - a_{21} x_1^{(k+1)} - a_{23} x_3^{(k)} - a_{24} x_4^{(k)} - \dots - a_{2m} x_m^{(k)}),$$

$$\dots$$

$$x_i^{(k+1)} = \frac{1}{a_{ii}} (f_i - a_{i1} x_1^{(k+1)} - a_{i2} x_2^{(k+1)} - \dots - a_{i,i-1} x_{i-1}^{(k-1)} - a_{i,i+1} x_{i+1}^{(k)} - \dots - a_{im} x_m^{(k)}),$$

$$\dots$$

$$x_m^{(k+1)} = \frac{1}{a_{11}} (f_1 - a_{11} x_1^{(k+1)} - a_{13} x_3^{(k+1)} - \dots - a_{1,m-1} x_{m-1}^{(k+1)}).$$

Достаточное условие сходимости этого метода такое же, как и для метода простой итерации, т.е. диагональное преобладание:

$$|a_{ii}| > \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^m |a_{ij}|, \quad i = 1, 2, \dots, m.$$

Начальное приближение

$$x_i^{(0)} = 0.$$

Найдем решение предыдущей системы уравнений методом Гаусса – Зейделя:

$$\begin{cases} 8x_1 + 4x_2 + 2x_3 = 10, \\ 3x_1 + 5x_2 + x_3 = 5, \\ 3x_1 - 2x_2 + 10x_3 = 4. \end{cases}$$

Расчетные формулы

$$\begin{cases} x_1^{(k+1)} = -0.5x_2^{(k)} - 0.25x_3^{(k)} + 1.25, \\ x_2^{(k+1)} = -0.6x_1^{(k+1)} - 0.2x_3^{(k)} + 1, \\ x_3^{(k+1)} = -0.3x_1^{(k+1)} + 0.2x_2^{(k+1)} + 0.4, \end{cases}$$

x1	x2	x3	Точность
0	0	0	
1.250	0.250	0.075	1.2500
1.106	0.321	0.132	0.1438
1.056	0.340	0.151	0.0500
1.042	0.344	0.156	0.0139
1.039	0.346	0.157	0.0036

$$x_1^{(1)} = -0.5 \cdot 0 - 0.25 \cdot 0 + 1.25 = 1.25,$$

$$x_2^{(1)} = -0.6 \cdot 1.25 - 0.2 \cdot 0 + 1 = 0.25,$$

$$x_3^{(1)} = -0.3 \cdot 1.25 + 0.2 \cdot 0.25 + 0.4 = 0.075.$$

$$\max \begin{pmatrix} |x_1^{(1)} - x_1^{(0)}| \\ |x_2^{(1)} - x_2^{(0)}| \\ |x_3^{(1)} - x_3^{(0)}| \end{pmatrix} = \max \begin{pmatrix} 1.25 \\ 0.25 \\ 0.075 \end{pmatrix} = 1.25 > \varepsilon = 0..$$

$$x_1^{(2)} = -0.5 \cdot 0.25 - 0.25 \cdot 0.075 + 1.25 = 1.106,$$

$$x_2^{(2)} = -0.6 \cdot 1.106 - 0.2 \cdot 0.075 + 1 = 0.321,$$

$$x_3^{(2)} = -0.3 \cdot 1.106 + 0.2 \cdot 0.321 + 0.4 = 0.132.$$

$$\max \begin{pmatrix} |x_1^{(2)} - x_1^{(1)}| \\ |x_2^{(2)} - x_2^{(1)}| \\ |x_3^{(2)} - x_3^{(1)}| \end{pmatrix} = \max \begin{pmatrix} 0.144 \\ 0.071 \\ 0.057 \end{pmatrix} = 0.144 > \varepsilon.$$

Из таблицы видно, что нужная точность достигнута уже на 5-й итерации вместо 13-й по методу простой итерации и значения корней более близки к значениям, полученным методом обратной матрицы $x_1 = 1.039$, $x_2 = 0.346$; $x_3 = 0.157$.

Лекция 5. Решение систем нелинейных уравнений (СНУ)

5.1. Этапы решения СНУ

При моделировании задача нахождения решения системы алгебраических или трансцендентных уравнений является распространенной вычислительной задачей. Например, к решению таких систем сводятся расчеты фазового и химического равновесия многокомпонентных смесей, расчеты статических режимов многих технологических процессов и др.

Запишем систему n нелинейных уравнений с n неизвестными (СНУ) в общем виде:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0, \\ f_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \\ \dots \\ f_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0. \end{cases} \quad (5.1)$$

Эту систему можно записать в компактной, операторной форме:

$$F(X) = 0, \quad (5.2)$$

где $F = \begin{bmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_n \end{bmatrix}$ – вектор-функция;

$X = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix}$ – вектор неизвестных.

Решением системы называется набор значений x_i^* , $i = \overline{1, n}$ (вектор X^*), при которых все функции f_i равны 0 (система обращается в тождество).

СНУ могут иметь единственное решение, множество решений или вообще не иметь их. Поэтому численное решение СНУ проводят в два этапа:

- 1 этап – отделение решений;
- 2 этап – уточнение всех или только нужных решений.

Отделить решения – значит установить количество решений, определить приближенные значения каждого из них или указать область, в которой решение существует и является единственным.

Задача отделения решений достаточно просто решается только для системы двух уравнений с двумя неизвестными:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = 0, \\ f_2(x_1, x_2) = 0. \end{cases} \quad (5.3)$$

Для этого необходимо в координатах (x_1, x_2) построить кривые

$$f_1(x_1, x_2) = 0, f_2(x_1, x_2) = 0. \quad (5.4)$$

Точки пересечения этих кривых являются решениями системы. Так как координаты точек пересечения определяются приближенно, целесообразно говорить об области существования решения D . Эта область задается интервалами по каждой координате, внутри которых находятся искомые значения неизвестных (рис.5.1).

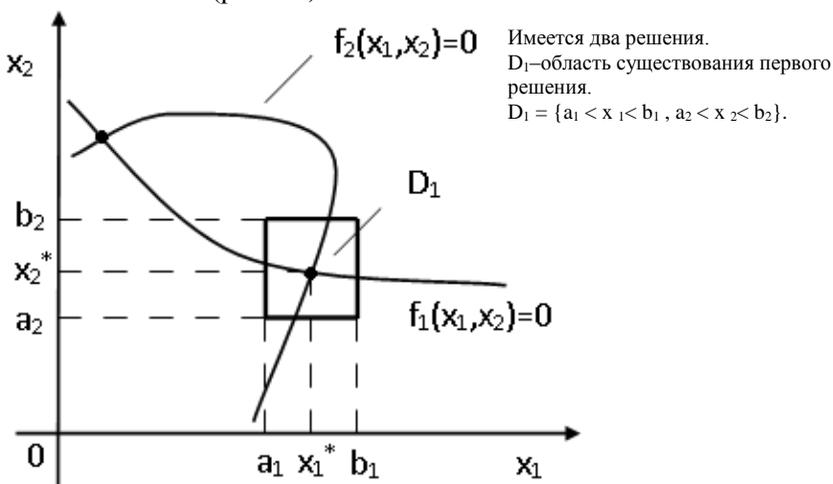


Рис. 5.1. Графическое отделение решений СДУ

Для систем с большим числом неизвестных ($n \geq 3$) удовлетворительных общих методов определения области существования решения нет. Поэтому при решении СНУ эта область обычно определяется при анализе решаемой задачи, например исходя из физического смысла неизвестных.

Отделение решений позволяет следующее:

- Выявить число решений и область существования каждого из них.
- Проанализировать возможность применения выбранного метода решения СНУ в каждой области.
- Выбрать начальное приближение решения $X^{(0)}$ из области его существования, так что $X^{(0)} \in D$.

При отсутствии информации об области существования решения СНУ выбор начального приближения $X^{(0)}$ проводится методом проб и ошибок.

Пример 5.1.

Отделить решения системы

$$\begin{cases} x^2 + y^2 = 1, \\ \ln(x) + 2y = -1. \end{cases} \quad (5.5)$$

Запишем систему в стандартном виде:

$$\begin{cases} f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0, \\ f_2(x_1, x_2) = \ln(x_1) + 2x_2 + 1 = 0. \end{cases} \quad (5.6)$$

Область определения функций

$$D_{f_1} = \{ |x_1| \leq 1, |x_2| \leq 1 \} \quad (5.7)$$

$$D_{f_2} = \{ x_1 > 0, x_2 \in R \}$$

Очевидно, что решения могут быть только в общей области определения этих функций:

$$D_0 = D_{f_1} \cap D_{f_2} = \{ 0 < x_1 \leq 1; |x_2| \leq 1 \}. \quad (5.8)$$

Решения существуют, т.к. $D_0 \neq \emptyset$.

Для отделения решения нужно построить графики функций в общей области определения (рис.5.2).

График первой функции – окружность единичного радиуса с центром в начале координат.

Для построения графика второй функции нужно вычислить значение $x_2 = -\frac{1}{2}(1 + \ln x_1)$, в нескольких точках общей области определения D_0 :

- при $x_1 = +0$ (очень маленькое положительное число)

$x_2 = +\infty$.

- при $x_1 = \frac{1}{e} \approx 0,33$ $x_2 = -\frac{1}{2}\left(1 + \ln \frac{1}{e}\right) = -\frac{1}{2}(1 - 1) = 0$. (5.9)

- при $x_1 = 1$ $x_2 = -\frac{1}{2}(1 + \ln 1) = -\frac{1}{2}$. (5.10)

- при $x_1 = 0,5$ $x_2 = -\frac{1}{2}\left(1 + \ln \frac{1}{2}\right) = -\frac{1}{2}(1 - 0,693) = -0,153$ (5.11)

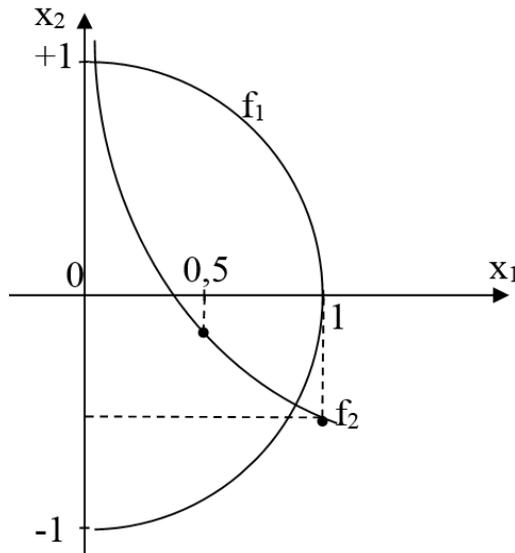


Рис.5.2. Графики функций в общей области определения

Имеются два решения.

Область существования первого решения

$$D_1 = \{0 < x_1 < 0,2; 0,8 < x_2 < 1\}, \quad (5.12)$$

второго решения

$$D_2 = \{0,8 < x_1 < 1; -0,5 < x_2 < -0,3\}. \quad (5.13)$$

Точность отделения решений зависит от точности построения графиков.

5.2. Метод Ньютона – Рафсона

Уточнение интересующего решения до требуемой точности ε производится итерационными методами.

Основные методы уточнения решений СНУ получены путем обобщения итерационных процессов, используемых при решении одного нелинейного уравнения.

Идея метода заключается в линеаризации уравнений системы, что позволяет свести исходную задачу решения СНУ к многократному решению системы линейных уравнений.

Рассмотрим, как были получены расчетные зависимости метода.

Пусть известно приближение $x_i^{(k)}$ решения системы нелинейных уравнений x_i^* . Введем в рассмотрение поправку Δx_i как разницу между решением и его приближением:

$$\Delta x_i = x_i^* - x_i^{(k)} \Rightarrow x_i^* = \overline{x_i^{(k)} + \Delta x_i}, \quad i = \overline{1, n}. \quad (5.14)$$

Подставим полученное выражение для x_i^* в исходную систему:

$$\begin{cases} f_1(x_1^{(k)} + \Delta x_1, x_2^{(k)} + \Delta x_2, \dots, x_n^{(k)} + \Delta x_n) = 0, \\ f_2(x_1^{(k)} + \Delta x_1, x_2^{(k)} + \Delta x_2, \dots, x_n^{(k)} + \Delta x_n) = 0, \\ \dots \\ f_n(x_1^{(k)} + \Delta x_1, x_2^{(k)} + \Delta x_2, \dots, x_n^{(k)} + \Delta x_n) = 0. \end{cases} \quad (5.15)$$

Неизвестными в этой системе нелинейных уравнений являются поправки Δx_i . Для определения Δx_i нужно решить эту систему. Но решить эту задачу так же сложно, как и исходную. Однако эту систему можно **линеаризовать**, и, решив ее, получить **приближенные значения** поправок Δx_i для данного приближения, т.е. $\Delta x_i^{(k)}$. Эти поправки не позволяют сразу

получить точное решение X_i^* , но дают возможность приблизиться к решению – получить новое приближение решения:

$$x_i^{(k+1)} = x_i^{(k)} + \Delta x_i^{(k)}, i = \overline{1, n}. \quad (5.16)$$

Для линеаризации системы следует разложить функцию f_i в ряды Тейлора в окрестности $x_i^{(k)}$, ограничиваясь первыми дифференциалами.

Полученная система имеет вид

$$\sum_{i=1}^n \frac{\partial f_i(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)})}{\partial x_i} \Delta x_i^{(k)} = -f_j(x_1^{(k)}, x_2^{(k)}, \dots, x_n^{(k)}). \quad (5.17)$$

$j = \overline{1, n}$

Все коэффициенты этого уравнения можно вычислить, используя последнее приближение решения $x_i^{(k)}$. Для решения системы линейных уравнений при $n=2,3$ можно использовать формулы Крамера, при большей размерности системы n – метод исключения Гаусса.

Значения поправок используются для оценки достигнутой точности решения. Если максимальная по абсолютной величине поправка меньше заданной точности ε , расчет завершается. Таким образом, условие окончания расчета

$$\delta = \max_{i=\overline{1, n}} |\Delta x_i^{(k)}| \leq \varepsilon. \quad (5.18)$$

Можно использовать и среднее значение модулей поправок:

$$\delta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\Delta x_i| < \varepsilon. \quad (5.19)$$

В матричной форме систему можно записать как

$$W(X^{(k)}) \cdot \Delta X^{(k)} = -F(X^{(k)}), \quad (5.20)$$

где

$$W(X) = \left(\frac{\partial f_j}{\partial x_i} \right)_{n,n} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n}{\partial x_1} & \frac{\partial f_n}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_n}{\partial x_n} \end{pmatrix} \text{ – матрица Якоби}$$

(производных); (5.21)

$$\Delta X^{(k)} = \begin{bmatrix} \Delta x_1^{(k)} \\ \Delta x_2^{(k)} \\ \dots \\ \Delta x_n^{(k)} \end{bmatrix} \text{ – вектор поправок; (5.22)}$$

$F(X)$ – вектор-функция;

$W(X^{(k)})$ – матрица Якоби, вычисленная для очередного приближения;

$F(X^{(k)})$ – вектор-функция, вычисленная для очередного приближения.

Выразим вектор поправок $\Delta X^{(k)}$:

$$\Delta X^{(k)} = -W^{-1}(X^{(k)}) \cdot F(X^{(k)}), \quad (5.23)$$

где W^{-1} – матрица, обратная матрице Якоби.

Окончательно формула последовательных приближений метода Ньютона решения СЧУ в матричной форме имеет вид

$$X^{(k+1)} = X^{(k)} - W^{-1}(X^{(k)}) \cdot F(X^{(k)}). \quad (5.24)$$

Достаточные условия сходимости для общего случая имеют очень сложный вид и на практике проверяются редко. Нужно отметить, что метод сходится очень быстро (за 3 – 5 итераций), если $\det|W| \neq 0$ и начальное приближение $X^{(0)}$ выбрано близким к решению (отличаются не более чем на 10 %).

Алгоритм решения СЧУ методом Ньютона состоит в следующем:

1. Задаются размерность системы n , требуемая точность ε , начальное приближенное решение $X = (x_i)_n$. (5.23)
 2. Вычисляются элементы матрицы Якоби: (5.24)
- $$W = (\partial f_i / \partial x_j)_{n,n}.$$
3. Вычисляется обратная матрица W^{-1} .

4. Вычисляется вектор-функция:

$$F=(f_i)_n, \quad f_i = f_i(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad i = \overline{1, n}. \quad (5.25)$$

5. Вычисляется вектор поправок: $\Delta X = W^{-1} \cdot F$. (5.26)

6. Уточняется решение: $X = X + \Delta X$. (5.27)

7. Оценивается достигнутая точность: $\delta = \max_{i=1, n} |\Delta x_i^{(k)}|$ или

$$\delta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\Delta x_i| \cdot \quad (5.28)$$

8. Проверяется условие завершения итерационного процесса:
 $\delta \leq \varepsilon$. (5.29)

9. Если оно не соблюдается, алгоритм выполняется снова с п.2.

Для уменьшения количества арифметических действий Рафсон предложил не вычислять обратную матрицу W^{-1} , а вычислять поправки как решение СЛУ:

$$W \cdot \Delta X = -F. \quad (5.30)$$

Достоинством методов Ньютона является быстрая сходимость, недостатками – сложность расчетов (вычисление производных, многократное решение системы линейных уравнений), сильная зависимость от начального приближения.

Пример 5.2.

Требуется методом Ньютона-Рафсона уточнить одно из решений системы:

$$\begin{cases} x_1^2 + x_2^2 = 1, \\ \ln x_1 + 2x_2 = -1. \end{cases} \quad (5.31)$$

Заданная точность $\varepsilon=0,001$. Решения отделены.

$$D_2 \in \{0,8 < x_1 < 1; -0,5 < x_2 < -0,3\}. \quad (5.32)$$

Запишем уравнения в стандартном виде:

$$f_1(x_1, x_2) = x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0, \quad (5.33)$$

$$f_2(x_1, x_2) = \ln x_1 + 2x_2 + 1 = 0.$$

$$\text{Начальное приближение } X(0) = (0,9; -0,4) \quad (5.34)$$

Первая итерация.

$$\text{Элементы матрицы Якоби } W=(w_{i,j})_{2,2}: \quad (5.35)$$

$$w_{1,1} = \frac{\partial f_1}{\partial x_1} = 2x_1 = 2 \cdot 0,9 = 1,8; \quad (5.36)$$

$$w_{1,2} = \frac{\partial f_1}{\partial x_2} = 2x_1 = 2 \cdot (-0,4) = -0,8; \quad (5.37)$$

$$w_{2,1} = \frac{\partial f_2}{\partial x_1} = \frac{1}{x_1} = \frac{1}{0,9} \approx 1,1111; \quad (5.38)$$

$$w_{2,2} = \frac{\partial f_2}{\partial x_2} = 2. \quad (5.39)$$

Значение функций:

$$f_1(0,9; -0,4) = 0,9^2 + 0,4^2 - 1 = 0,81 + 0,16 - 1 = -0,03 \quad (5.40)$$

$$f_2(0,9; -0,4) = \ln(0,9) + 2 \cdot (-0,4) + 1 = -0,1054 + 0,2 + 1 = 0,0946. \quad (5.41)$$

Для вычисления поправок нужно решить систему

$$\begin{cases} 1,8 \cdot \Delta x_1 - 0,8 \cdot \Delta x_2 = -(-0,03), \\ 1,1111 \cdot \Delta x_1 + 2 \cdot \Delta x_2 = -0,0946. \end{cases} \quad (5.42)$$

По формулам Крамера

$$\det W = \begin{vmatrix} 1,8 & -0,8 \\ 1,1111 & 2 \end{vmatrix} = 1,8 \cdot 2 - 0,8 \cdot 1,1111 = 3,6 - 0,88888 \approx 2,71112; \quad (5.43)$$

$\det W \neq 0$ – система обусловлена;

$$\det W_1 = \begin{vmatrix} 0,03 & -0,8 \\ -0,0946 & 2 \end{vmatrix} = 0,03 \cdot 2 - 0,8 \cdot 0,0946 \approx -0,0157; \quad (5.44)$$

$$\det W_2 = \begin{vmatrix} 1,8 & 0,03 \\ 1,1111 & -0,0946 \end{vmatrix} = -1,8 \cdot 0,0946 - 0,03 \cdot 1,1111 \approx -0,2036; \quad (5.45)$$

$$\Delta x_1 = \frac{\det W_1}{\det W} = \frac{-0,0157}{2,71112} \approx -0,0035; \quad (5.46)$$

$$\Delta x_2 = \frac{\det W_2}{\det W} = \frac{-0,2036}{2,71112} \approx -0,0454. \quad (5.47)$$

Первое приближение решения:

$$x_1 = x_1 + \Delta x_1 = 0,9 + (-0,0035) = 0,8965; \quad (5.48)$$

$$x_2 = x_2 + \Delta x_2 = -0,4 + (-0,0454) = -0,4454. \quad (5.49)$$

Оценка достигнутой точности

$$\delta = \max_{i=1,2} |\Delta x_i| = \max(|\Delta x_1|, |\Delta x_2|) = 0,0454. \quad (5.50)$$

Нужно продолжить итерационный процесс, т.к. $\delta > \varepsilon$.

После второй итерации требуемая точность достигается

$$x_1 = 0,8995, x_2 = -0,4449, \delta \approx 0,001. \quad (5.51)$$

Лекция 6. Обыкновенные дифференциальные уравнения

6.1. Метод Эйлера (Рунге-Кутта 1-го порядка)

Разобьем $[a, b]$ на n равных частей – *элементарных отрезков*, x_0, x_1, \dots, x_n будем называть *узлами сетки*,

$$h = (b-a)/n \text{ – шаг сетки.} \quad (6.1)$$

$$\text{Очевидно, что } x_i = a + i \cdot h, \quad i = \overline{0, 1, \dots, n}; \quad x_0 = a, \quad x_n = b. \quad (6.2)$$

Заменяем в уравнении (6.1) y' в точке x_i её приближенной оценкой – отношением приращений (это следует из определения производной):

$$y'_i \approx \frac{\Delta y_i}{\Delta x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{x_{i+1} - x_i} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h}. \quad (6.3)$$

Тогда получаем

$$\frac{y_{i+1} - y_i}{h} \approx f(x_i, y_i). \quad (6.4)$$

Отсюда формула Эйлера

$$y_{i+1} \approx y_i + h \cdot f(x_i, y_i), \quad (6.5)$$

$$\text{где } x_i = a + i \cdot h, \quad i = \overline{0, 1, \dots, n-1} \text{ – номер узла.} \quad (6.6)$$

Зная y_0 в точке x_0 (начальное условие), можно найти y_1 , затем, используя уже известные значения x_1 и y_1 , вычислить x_2 и y_2 и так далее.

Рассмотрим геометрическую иллюстрацию метода Эйлера (рис.6.1). В координатах (x, y) отобразим известные данные: отрезок $[a, b]$ на оси X и начальное условие y_0 – точка A с координатами (a, y_0) . Отрезок $[a, b]$ разобьем на n равных частей, получим узлы равномерной сетки: $a = x_0, x_1, x_2, \dots, x_n = b$. Вычислим значения первой производной искомой функции в точке A , используя координату этой точки и исходное уравнение

$$y'(x_0) = f(x_0, y_0) = \operatorname{tg} \alpha_0. \quad (6.7)$$

Полученное значение позволяет построить касательную к искомой функции в точке A . Эту касательную можно

использовать для вычисления приближенного значения искомой функции в новом узле x_1 (кривую $y(x)$ заменяем отрезком АВ на элементарном отрезке $[x_0, x_1]$).

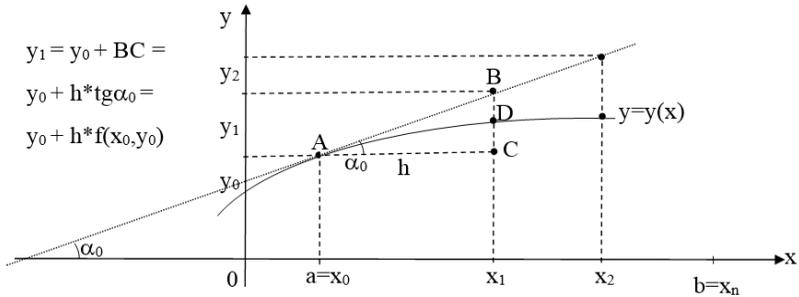


Рис. 6.1. Геометрическая иллюстрация метода Эйлера

Зная (x_1, y_1) , можно аналогично получить новую точку (x_2, y_2) и т.д.

Из геометрической иллюстрации следует:

- На каждом шаге есть погрешность (на рисунке это отрезок **BD**). **Погрешность тем больше, чем больше шаг.**
- Ошибка может накапливаться.

Формула Эйлера (6.5) имеет погрешность метода

$$\delta_M = O(h^2). \quad (6.8)$$

Для практического выбора h в целях обеспечения заданной точности решения задачи ε применяется следующий прием.

Выполняются 2 расчета: с n и $2n$ узлами. Если полученные значения функции в во всех узлах отличаются не более чем на ε , задача считается решенной. Если нет, число узлов вновь удваивают и опять сравнивают полученные значения функций.

Таким образом, расчет продолжается до достижения условия

$$\delta = \max_{i=1, n} |y_i^n - y_i^{2n}| \leq \varepsilon. \quad (6.9)$$

Значение n может достигать большой величины – более 1000. Чтобы не печатать столько значений функции, в алгоритме решения ОДУ методом Эйлера нужно предусмотреть печать не всех рассчитанных значений, а только части их, например 10 значений, распределенных равномерно по всему отрезку.

Алгоритм расчета новой точки методом Эйлера представлен на рис.6.2.

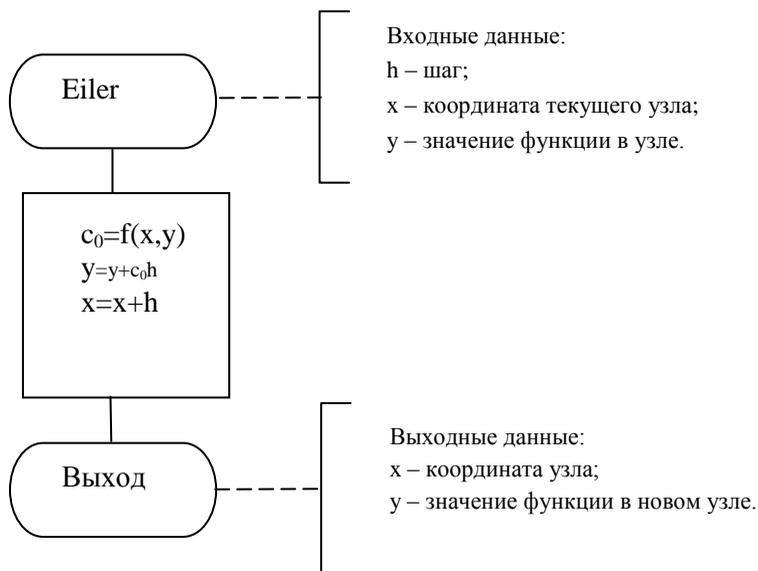


Рис. 6.2. Алгоритм расчета новой точки методом Эйлера

Пример 6.1.

Дано уравнение $y' - 2y + x^2 = 1$. (6.10)

Найти решение для отрезка $[0; 1]$, если $y(0) = 1$. (6.11)

Выберем $n = 10$, тогда шаг $h = (1-0)/10 = 0,1$. (6.12)

Запишем уравнение в каноническом виде

$$y' = f(x, y) = 1 + 2y - x^2. \quad (6.13)$$

Начальная точка $x_0 = 0, y_0 = 1$. (6.14)

Вычислим первую точку:

$$y_1 = y_0 + h \cdot f(x_0; y_0) = 1 + 0,1 \cdot f(0; 1) = \quad (6.15)$$

$$= 1 + 0,1 \cdot (1 + 2 \cdot 1 - 0^2) = 1 + 0,1 \cdot 3 = 1,3,$$

$$x_1 = x_0 + h = 0 + 0,1 = 0,1. \quad (6.16)$$

Вычислим вторую точку:

$$y_2 = y_1 + h \cdot f(x_1; y_1) = 1,3 + 0,1 \cdot f(0,1; 1,3) =$$

$$= 1,3 + 0,1 \cdot (1 + 2,6 - 0,01) = 1,3 + 0,1 \cdot 3,59 = 1,659 \quad , \quad (6.17)$$

$$x_2 = x_1 + h = 0,1 + 0,1 = 0,2 \quad . \quad (6.18)$$

Аналогично нужно вычислить еще восемь точек (выбрано $n=10$).

6.2. Модифицированный метод Эйлера (Рунге-Кутта 2-го порядка)

Для повышения точности формула Эйлера применяется дважды на каждом элементарном отрезке: сначала для вычисления значения функции в середине отрезка \bar{y} , затем это значение используется для вычисления тангенса угла наклона касательной к графику искомой функции в середине отрезка.

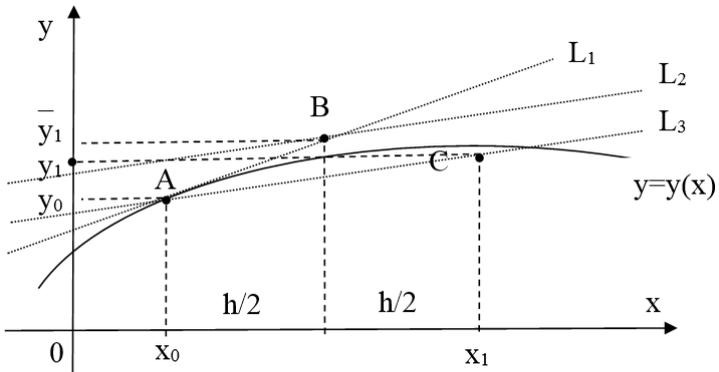


Рис. 6.3. Геометрическая иллюстрация модифицированного метода Эйлера:

A – начальная точка;

L1 – касательная к $y(x)$ в точке A;

L2 – касательная к $y(x)$ в середине элементарного отрезка;

L3 – параллельно L2 через т. A

Расчётные формулы:

$$\bar{y}_1 = y_0 + \frac{h}{2} \cdot f(x_0, y_0) \text{ — значение функции} \quad (6.18)$$

в середине отрезка $[x_0, x_1]$;

$$y_1 = y_0 + h \cdot f\left(x_0 + \frac{h}{2}, \bar{y}_1\right) \text{ — значение функции в конце} \quad (6.19)$$

отрезка $[x_0, x_1]$.

Формула модифицированного метода Эйлера

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} \cdot f(x_i, y_i)\right), \quad (6.20)$$

где $i = 0, 1, \dots, n-1$ — номер узла;

$x_i = a + i \cdot h$ — координата узла;

$$y_0 = y(x_0) \text{ — начальное условие.} \quad (6.21)$$

$$\text{Погрешность метода } \delta \approx O(h^3). \quad (6.22)$$

Пример 6.2.

Решаем ранее рассмотренное уравнение (пример 6.1) модифицированным методом Эйлера.

$$\dot{y} - 2 \cdot y + x^2 = 1, \quad x \in [0; 1], \quad y(0) = 1. \quad (6.23)$$

$$\text{Пусть } n = 10, \quad h = (1 - 0)/10 = 0,1. \quad (6.24)$$

$$\text{Начальная точка } x_0 = 0, \quad y_0 = 1. \quad (6.25)$$

Расчёт первой точки:

$$\begin{aligned} y_1 &= y_0 + h \cdot f\left(x_0 + \frac{h}{2}; y_0 + \frac{h}{2} \cdot f(x_0; y_0)\right) = \\ &= 1 + 0,1 \cdot f\left(0 + \frac{0,1}{2}; 1 + \frac{0,1}{2} \cdot f(0; 1)\right) = \\ &= 1 + 0,1 \cdot f(0,05; 1 + 0,05 \cdot (1 + 2 \cdot 1 - 0^2)) = \\ &= 1 + 0,1 \cdot f(0,05; 1,15) = 1 + 0,1 \cdot (1 + 2 \cdot 1,15 - 0,05^2) = \\ &= 1,32975; \\ x_1 &= x_0 + h = 0,1. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Аналогично рассчитываем следующие точки: 2, 3, ..., 10.

Алгоритм расчёта новой точки модифицированным методом Эйлера представлен на рис.6.4.

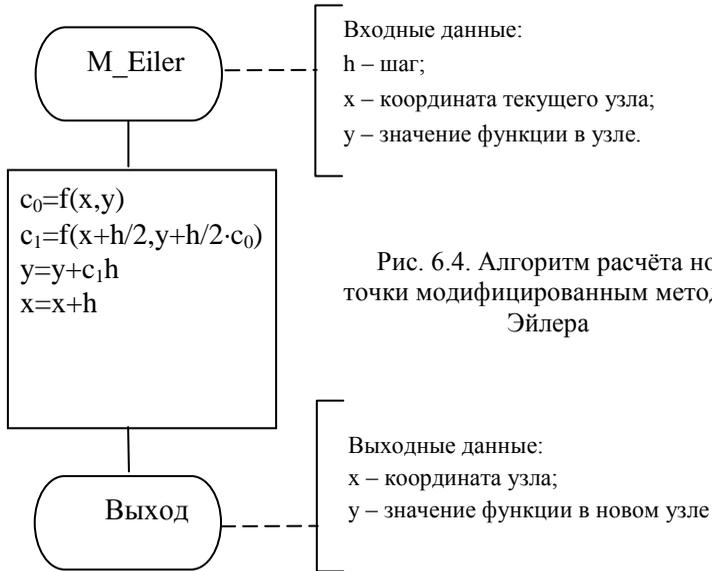


Рис. 6.4. Алгоритм расчёта новой точки модифицированным методом Эйлера

6.3. Исправленный метод Эйлера

В данном методе для повышения точности используется усреднённое значение производной на рассматриваемом отрезке:

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot \frac{y'_i + y'_{i+1}}{2} = y_i + \frac{h}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1})]. \quad (6.27)$$

В приведённой формуле y_{i+1} входит в обе части уравнения и не может быть выражен явно. Чтобы обойти эту трудность, в правую часть вместо y_{i+1} подставляется значение, рассчитанное по формуле Эйлера:

$$\overline{y_{i+1}} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i). \quad (6.28)$$

Получаем формулу исправленного метода Эйлера

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2} \cdot [f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_i + h \cdot f(x_i, y_i))], \quad i = \overline{0, n-1}, \quad (6.29)$$

где $i = 0, 1, \dots, n-1$ – номер узла;

$x_i = a + i \cdot h$ – координата узла;

$$y_0 = y(x_0) - \text{начальное условие.} \quad (6.30)$$

$$\text{Погрешность исправленного метода Эйлера } \delta_M = O(h^3). \quad (6.31)$$

Алгоритм решения ОДУ отличается от описанного ранее алгоритма метода Эйлера только алгоритмом расчета новой точки. Алгоритм представлен на рис. 6.5.

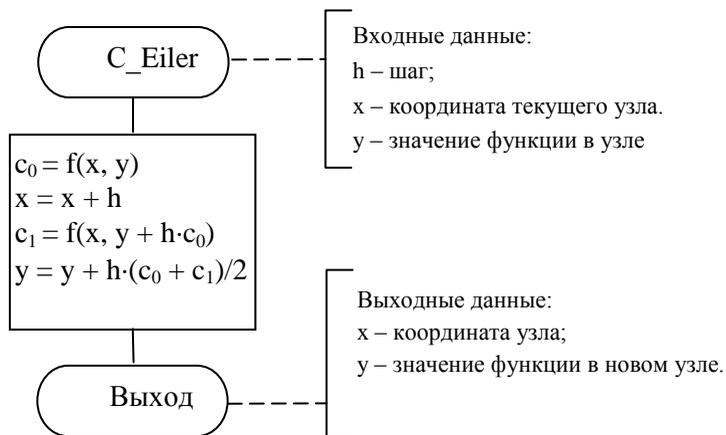


Рис. 6.5. Алгоритм расчёта новой точки исправленным методом Эйлера

Геометрическая иллюстрация представлена на рис. 6.6.

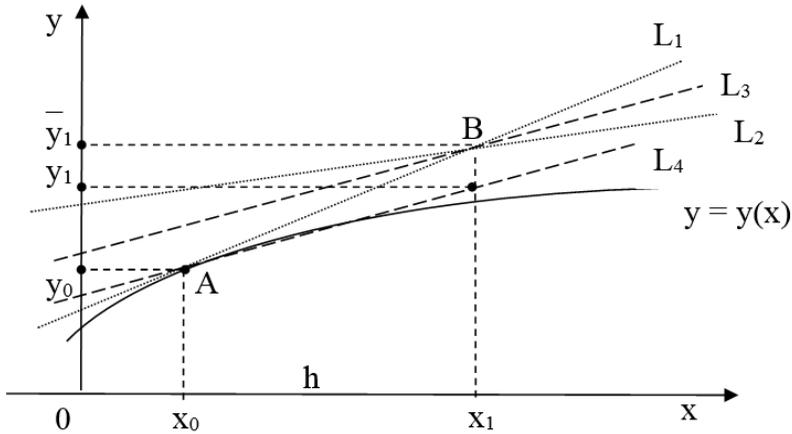


Рис. 6.6. Геометрическая иллюстрация исправленного метода Эйлера

L_1 – касательная к $y(x)$ в начальной точке A , с $\operatorname{tg}\alpha_0 = f(x_0, y_0)$;

B – значение $\overline{y_1}$ вычисляется по формуле Эйлера;

L_2 – касательная к $y(x)$ в точке B , с $\operatorname{tg}\alpha_1 = f(x_1, \overline{y_1})$;

L_3 – прямая через B со среднеарифметическим углом наклона;

L_4 – прямая, параллельная L_3 , проведенная через точку A

Пример 6.3.

Решаем ранее рассмотренное уравнение (пример 6.1) исправленным методом Эйлера

$$y' - 2 \cdot y + x^2 = 1, \quad x \in [0;1], \quad y(0) = 1. \quad (6.32)$$

$$\text{Пусть } n = 10, \quad h = (1 - 0)/10 = 0,1. \quad (6.33)$$

$$\text{Начальная точка } x_0 = 0, \quad y_0 = 1. \quad (6.34)$$

Рассчитываем первую точку:

$$\begin{aligned}
y_1 &= y_0 + \frac{h}{2} \cdot \left[f(x_0; y_0) + f\left(x_0 + \frac{h}{2}; y_0 + \frac{h}{2} \cdot f(x_0; y_0)\right) \right] = \\
&= 1 + \frac{0,1}{2} \cdot [f(0,1) + f(0 + 0,1; 1 + 0,1 \cdot f(0; 1))] = \\
&= 1 + \frac{0,1}{2} \cdot [(1 + 2 \cdot 1 - 0^2) + f(0,1; 1 + 0,1 \cdot (1 + 2 \cdot 1 - 0^2))] = \\
&= 1 + 0,05 \cdot [3 + f(0,1; 1,3)] = 1 + 0,05 \cdot [3 + 1 + 2 \cdot 1,3 - 0,1^2] = \\
&= 1 + 0,05 \cdot [3 + 3,59] = 1 + 0,05 \cdot 6,59 = 1,3295; \\
x_1 &= x_0 + h = 0,1.
\end{aligned} \tag{6.35}$$

Аналогично можно вычислить значения функции в 2, 3, ... , 10 точках.

Лекция 7. Интерполяция и аппроксимация

7.1. Задача интерполяции

В вычислительной математике существенную роль играет интерполяция функций, т.е. построение по заданной функции другой (как правило, более простой), значения которой совпадают со значениями заданной функции в некотором числе точек. Причем интерполяция имеет как практическое, так и теоретическое значение. На практике часто возникает задача о восстановлении непрерывной функции по ее табличным значениям, например, полученным в ходе некоторого эксперимента. Для вычисления многих функций оказывается эффективно приблизить их полиномами.

Пусть на отрезке $[a, b]$ задана функция $f(x)$. Задача интерполяции (или интерполирования) состоит в построении функции $g(x)$, совпадающей с заданной $f(x)$ в некотором наборе точек $\{x_1, x_2, \dots, x_{n+1}\}$ из отрезка $[a, b]$ (эти точки называются узлами интерполяции), т.е. должны выполняться условия

$$g(x_k) = y_k, \quad k = 1, 2, \dots, n+1,$$

где y_k - известные значения функции $f(x)$ в точках x_k . Функция $g(x)$ называется интерполянтом функции $f(x)$.

Пример интерполяции с четырьмя узлами приведен на рис. 7.1.

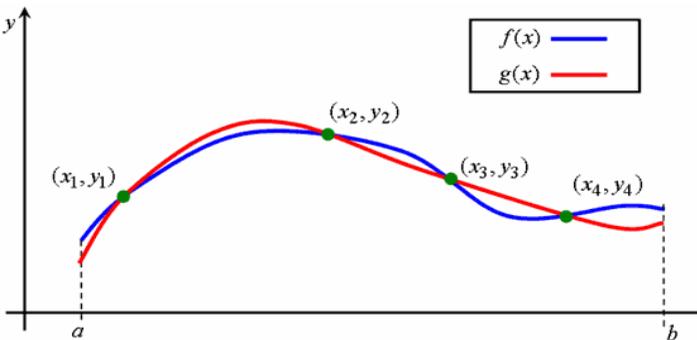


Рис. 7.1. Пример интерполяции функции четырьмя узлами

Из рис. 7.1. видно, что узлы интерполяции необязательно должны располагаться равномерно на отрезке $[a, b]$.

На качество приближения сильное влияние оказывают количество и расположение узлов, а также гладкость функции $f(x)$.

Рассмотрим только линейную интерполяцию, т.е. такую, при которой функция $g(x)$ разыскивается в виде линейной комбинации некоторых функций

$$g(x) = \sum_{k=1}^{n+1} a_k \varphi_k(x),$$

где для $k=1, 2, \dots, n+1$ $\varphi_k(x)$ – заданные функции, а a_k – искомые коэффициенты.

Ясно, что из постановки задачи интерполяции (т.е. из совпадения значений интерполянта $g(x)$ и интерполируемой функции $f(x)$ в точках x_k) следует, что коэффициенты a_k определяются из решения следующей системы линейных алгебраических уравнений:

$$\sum_{k=1}^{n+1} a_k \varphi_k(x_j) = y_j, \quad j = 1, 2, \dots, n+1.$$

Число узлов интерполяционного полинома всегда должно быть на единицу больше его степени. Это понятно также из следующих простых соображений: через две точки проходит единственная прямая, через три – единственная парабола и т.д.

Пусть функция $f(x)$ задана таблицей своих значений x_i, y_i на интервале $[a, b]$:

$$y_i = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n, \quad a \leq x_i \leq b. \quad (7.1)$$

Задача интерполяции – найти функцию $F(x)$, принимающую в точках x_i те же значения y_i .

Условие интерполяции:

$$F(x_i) = y_i \quad (7.2)$$

При этом предполагается, что среди значений нет одинаковых. Точки x_i называют узлами интерполяции.

Если $F(x)$ ищется только на отрезке $[a,b]$, то это задача интерполяции, а если за пределами первоначального отрезка, то это задача экстраполяции.

Интерполяция – определение промежуточных значений функции по известному дискретному набору значений функции.

Экстраполяция – определение значений функции за пределами первоначально известного интервала.

Аппроксимация – определение в явном виде параметров функции, описывающей распределение точек.

Задача нахождения интерполяционной функции $F(x)$ имеет много решений, так как через заданные точки x_i, y_i можно провести бесконечно много кривых, каждая из которых будет графиком функции, для которой выполнены все условия интерполяции. Для практики важен случай аппроксимации функции многочленами:

$$F(x) = P_m(x_i) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_m \cdot x^m, \\ i = 0, 1, \dots, m. \quad (7.3)$$

При этом искомым полином называется интерполяционным полиномом.

При построении одного многочлена для всего рассматриваемого интервала $[a,b]$, для нахождения коэффициентов многочлена необходимо использовать все уравнения системы (7.3). Данная система содержит $n+1$ уравнение, следовательно, с ее помощью можно определить $n+1$ коэффициент. Поэтому максимальная степень интерполяционного многочлена $m=n$, и многочлен принимает вид

$$P_n(x_i) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_n \cdot x^n, \\ i = 0, 1, \dots, n. \quad (7.4)$$

Аппроксимировать – это означает «приблизённо заменять». Допустим, известны значения некоторой функции в заданных точках. Требуется найти промежуточные значения этой функции. Это так называемая задача о **восстановлении функции**. Кроме того, при проведении расчетов сложные функции удобно заменять алгебраическими многочленами или

другими элементарными функциями, которые достаточно просто вычисляются (**задача о приближении функции**).

7.2. Постановка задачи интерполяции

На интервале $[a, b]$ заданы точки $x_i, i=0, 1, \dots, N; a \leq x_i \leq b$, и значения неизвестной функции в этих точках $f_i, i=0, 1, \dots, N$. Требуется найти функцию $F(x)$, принимающую в точках x_i те же значения f_i . Точки x_i называются **узлами интерполяции**, а условия $F(x_i) = f_i$ – **условиями интерполяции**. При этом $F(x)$ ищем только на отрезке $[a, b]$. Если необходимо найти функцию вне отрезка, то это задача **экстраполяции**. Пока мы будем рассматривать только интерполяционные задачи.

Задача имеет много решений, т.к. через заданные точки $(x_i, f_i), i=0, 1, \dots, N$, можно провести бесконечно много кривых, каждая из которых будет графиком функции, для которой выполнены все условия интерполяции. Для практики важен случай аппроксимации функции многочленами, т.е. $F(x) = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + \dots + a_m \cdot x^m$.

Все методы интерполяции можно разделить на **локальные** и **глобальные**. В случае *локальной интерполяции* на каждом интервале $[x_{i-1}, x_i]$ строится отдельный полином. В случае *глобальной интерполяции* отыскивается единый полином на всем интервале $[a, b]$. При этом искомым полином называется **интерполяционным полиномом**.

7.3. Локальная интерполяция.

Кусочно–постоянная интерполяция

На каждом отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ интерполяционный многочлен равен константе, а именно: левому или правому значению функции.

Для левой кусочно-линейной интерполяции

$$F(x) = f_{i-1}, \text{ если } x_{i-1} \leq x < x_i, \text{ т.е.}$$

$$F(x) = \begin{cases} f_0, & x_0 \leq x < x_1, \\ f_1, & x_1 \leq x < x_2, \\ \dots & \dots \\ f_{N-1}, & x_{N-1} \leq x < x_N. \end{cases}$$

Для правой кусочно-линейной интерполяции

$$F(x) = f_i, \text{ если } x_{i-1} < x \leq x_i, \text{ т.е.}$$

$$F(x) = \begin{cases} f_1, & x_0 < x \leq x_1, \\ f_2, & x_1 < x \leq x_2, \\ \dots & \dots \\ f_N, & x_{N-1} < x \leq x_N. \end{cases}$$

Легко понять, что условия интерполяции выполняются. Построенная функция является разрывной, что ограничивает ее применение. Для левой кусочно-линейной интерполяции имеем графическое представление (рис. 7.2):

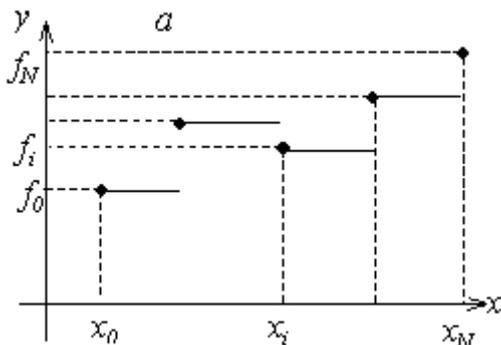


Рис. 7.2. Графическое представление левой кусочно-линейной интерполяции

7.4. Кусочно-линейная интерполяция

На каждом интервале $[x_{i-1}, x_i]$ функция является линейной $F_i(x) = k_i x + l_i$. Значения коэффициентов находятся

из выполнения условий интерполяции в концах отрезка: $F_i(x_{i-1}) = f_{i-1}, F_i(x_i) = f_i$. Получаем систему уравнений $k_i x_{i-1} + l_i = f_{i-1}, k_i x_i + l_i = f_i$, откуда находим $k_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, l_i = f_i - k_i x_i$. Следовательно, функцию $F(z)$ можно записать в виде

$$F(x) = \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} x + f_i - k_i x_i, \text{ если } x_{i-1} \leq x \leq x_i, \text{ т.е.}$$

$$F(x) = \begin{cases} \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} x + f_0 - k_0 x_0, & x_0 \leq x \leq x_1, \\ \frac{f_2 - f_1}{x_2 - x_1} x + f_1 - k_1 x_1, & x_1 \leq x \leq x_2, \\ \dots \\ \frac{f_N - f_{N-1}}{x_N - x_{N-1}} x + f_{N-1} - k_{N-1} x_{N-1}, & x_{N-1} \leq x \leq x_N. \end{cases}$$

Или $F(x) = k_i(x - x_{i-1}) + f_{i-1}$,

$$k_i = \frac{f_i - f_{i-1}}{x_i - x_{i-1}}, \quad x_{i-1} \leq x \leq x_i, \quad i = 1, 2, \dots, N - 1.$$

При использовании линейной интерполяции сначала нужно определить интервал, в который попадает значение x , а затем подставить его в формулу.

Итоговая функция будет непрерывной, но производная будет разрывной в каждом узле интерполяции. Погрешность такой интерполяции будет меньше, чем в случае кусочно-постоянной интерполяции. Иллюстрация кусочно-линейной интерполяции приведена на рис 7.3.

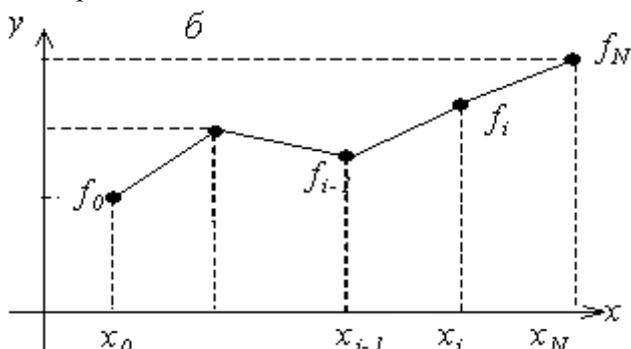


Рис. 7.3. Иллюстрация кусочно-линейной интерполяции

Пример 7.2.

Заданы значения некоторой функции:

x	0	2	3	3.5
f	-1	0.2	0.5	0.8

Требуется найти значение функции при $z=1$ и $z=3.2$ по кусочно-постоянной и кусочно-линейной интерполяциям.

Решение. Точка $z=1$ принадлежит первому локальному отрезку $[0, 2]$, т.е. $i=1$, и, следовательно, по формулам левой кусочно-постоянной интерполяции $F(1) = f_0 = -1$, по формулам правой кусочно-постоянной интерполяции $F(1)=f_1=0.2$. Воспользуемся формулами кусочно-линейной интерполяции

$$k_1 = \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} = 0.6,$$

$$l_1 = f_1 - k_1 x_1 = -1, F(1) = -1 + 0.6 \cdot 1 = -0.4.$$

Точка $z=3.2$ принадлежит третьему интервалу $[3, 3.5]$, т.е. $i=3$, и, следовательно, по формулам левой кусочно-постоянной интерполяции $F(3.2) = f_2 = 0.5$, по формулам правой кусочно-постоянной интерполяции $F(3.2)=f_3=0.8$. Воспользуемся формулами кусочно-линейной интерполяции

$$k_3 = \frac{f_3 - f_2}{x_3 - x_2} = \frac{0.8 - 0.5}{3.5 - 3} = 0.6,$$

$$l_3 = f_3 - k_3 x_3 = 0.8 - 0.6 \cdot 3.5 = -1.3,$$
$$F(3.2) = 0.6 \cdot 3.2 - 1.3 = 0.62.$$

7.5. Кубический интерполяционный сплайн

Слово сплайн (английское слово "spline") означает гибкую линейку, используемую для проведения гладких кривых через заданные точки на плоскости. Форма этого универсального лекала на каждом отрезке описывается кубической параболой. Сплайны широко используются в инженерных приложениях, в частности в компьютерной графике. Итак, на каждом i -м

отрезке $[x_{i-1}, x_i]$, $i=1, 2, \dots, N$ решение будем искать в виде полинома третьей степени

$$S_i(x) = a_i + b_i(x - x_i) + \frac{c_i(x-x_i)^2}{2} + \frac{d_i(x-x_i)^3}{6}.$$

Неизвестные коэффициенты $a_i, b_i, c_i, d_i, i=1, 2, \dots, N$, находим:

- из условий интерполяции $S_i(x_i)=f_i, i=1, 2, \dots, N; S_1(x_0)=f_0;$
- непрерывности функции $S_i(x_{i-1})=S_{i-1}(x_{i-1}), i=2, 3, \dots, N;$
- непрерывности первой и второй производных $S'_i(x_{i-1})=S'_{i-1}(x_{i-1}), S''_i(x_{i-1})=S''_{i-1}(x_{i-1}), i=2, 3, \dots, N.$

Учитывая, что

$$S_{i-1}(x) = a_{i-1} + b_{i-1}(x - x_i) + \frac{c_{i-1}(x - x_i)^2}{2} + \frac{d_{i-1}(x - x_i)^3}{6}.$$

для определения $4N$ неизвестных получаем систему $4N-2$ уравнений:

$$a_i=f_i, i=1, 2, \dots, N,$$

$$b_i h_i - \frac{c_i h_i^2}{2} + \frac{d_i h_i^3}{6} = f_i - f_{i-1}, i = 1, 2, \dots, N,$$

$$b_i - b_{i-1} = c_i h_i + \frac{d_i h_i^2}{2}, i = 2, 3, \dots, N,$$

$$d_i h_i = c_i - c_{i-1}, i = 2, 3, \dots, N,$$

где $h_i = x_i - x_{i-1}$. Недостающие два уравнения выводятся из дополнительных условий: $S''(a)=S''(b)=0$. Можно показать, что при этом $c_0 = c_N = 0$. Из системы можно исключить неизвестные b_i, d_i , получив систему $N+1$ линейных уравнений (СЛАУ) для определения коэффициентов c_i :

$$c_0 = 0, c_N = 0,$$

$$h_i c_{i-1} + 2(h_i + h_{i+1})c_i + h_{i+1}c_{i+1} = 6 \left(\frac{f_{i+1} - f_i}{h_i} - \frac{f_i - f_{i-1}}{h_{i-1}} \right),$$

(7.5)

После этого вычисляются коэффициенты b_i, d_i :

$$d_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{h_i}, b_i = \frac{c_i h_i}{2} - \frac{d_i h_i^2}{6} + \frac{f_i - f_{i-1}}{h_i}, i=1, 2, \dots, N. (7.6)$$

В случае постоянной сетки $h_i=h$ эта система уравнений упрощается:

$$4c_1 + c_2 = 6 \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2},$$

$$c_{i-1} + 4c_i + c_{i+1} = 6 \frac{f_{i+1} - 2f_i + f_{i-1}}{h^2},$$

$$i = 2, \dots, N-2,$$

$$c_{N-2} + 4c_{N-1} = 6 \frac{f_N - 2f_{N-1} + f_{N-2}}{h^2},$$

$$c_N = 0.$$

Данная СЛАУ имеет трехдиагональную матрицу и решается методом прогонки.

Коэффициенты b_i, d_i определяются из формул

$$d_i = \frac{c_i - c_{i-1}}{h},$$

$$b_i = \frac{1}{2}c_i h - \frac{1}{6}d_i h^2 + \frac{(f_i - f_{i-1})}{h},$$

$$a_i = f_i.$$

Для вычисления значения $S(x)$ в произвольной точке отрезка $z \in [a, b]$ необходимо решить систему уравнений на коэффициенты $c_i, i=1, 2, \dots, N-1$, затем найти все коэффициенты b_i, d_i . Далее необходимо определить, на какой интервал $[x_{i_0}, x_{i_0+1}]$ попадает эта точка, и, зная номер i_0 , вычислить значение сплайна и его производных в точке z :

$$S(z) = a_{i_0} + b_{i_0}(z - x_{i_0}) + c_{i_0} \frac{(z - x_{i_0})^2}{2} + d_{i_0} \frac{(z - x_{i_0})^3}{6},$$

$$S'(z) = b_{i_0} + c_{i_0}(z - x_{i_0}) + d_{i_0} \frac{(z - x_{i_0})^2}{2},$$

$$S''(z) = c_{i_0} + d_{i_0}(z - x_{i_0}).$$

Пример 7.3.

Дан набор точек:

x_0, f_0	x_1, f_1	x_2, f_2	x_3, f_3	x_4, f_4
0	$\frac{1}{4}$	$\frac{1}{2}$	$\frac{3}{4}$	1
1	2	1	0	1

Требуется вычислить значения функции в точках 0.25 и 0.8, используя сплайн-интерполяцию.

В нашем случае

$$h_i = \frac{1}{4}, f_0 = 1, f_1 = 2, f_2 = 1, f_3 = 0, f_4 = 1, N = 4.$$

Выпишем систему уравнений для определения c_i :

$$4c_1 + c_2 = 6 \frac{f_2 - 2f_1 + f_0}{h^2} = 6 \frac{1 - 2 \cdot 2 + 1}{16} \cdot 16 = -192,$$

$$c_1 + 4c_2 + c_3 = 6 \frac{f_1 - 2f_2 + f_3}{h^2} = 0,$$

$$c_2 + 4c_3 = 6 \frac{f_4 - 2f_3 + f_2}{h^2} = 192,$$

$$c_N = 0.$$

Решая эту систему линейных уравнений, получим

$$c_1 = -48, c_2 = 0, c_3 = 48, c_4 = 0.$$

$$d_1 = \frac{c_1 - c_0}{-h} = 4 \cdot (-48) = -192,$$

$$d_2 = \frac{c_2 - c_1}{h} = 192,$$

$$d_3 = \frac{c_3 - c_2}{h} = 192,$$

$$d_4 = \frac{c_4 - c_3}{h} = -192.$$

$$b_1 = \frac{1}{2} c_1 h - \frac{1}{6} d_1 h^2 + \frac{(f_1 - f_0)}{h} = 0,$$

$$b_2 = \frac{1}{2} c_2 h - \frac{1}{6} d_2 h^2 + \frac{(f_2 - f_1)}{h} = -6,$$

$$b_3 = \frac{1}{2} c_3 h - \frac{1}{6} d_3 h^2 + \frac{(f_3 - f_2)}{h} = 0,$$

$$b_4 = \frac{1}{2} c_4 h - \frac{1}{6} d_4 h^2 + \frac{(f_4 - f_3)}{h} = 6.$$

Рассмотрим точку 0.25, которая принадлежит первому отрезку, т.е. $i = 1$. Следовательно, получим

$$S(z) = a_1 + b_1(z - x_0) + \frac{1}{2} c_1(z - x_0)^2 + \frac{1}{6} d_1(z - x_0)^3,$$

$$S(0.25) = 2 + 0 \cdot (0.25 - 0) + \frac{1}{2} \cdot (-48) \cdot (0.25 - 0)^2 +$$

$$+\frac{1}{6}(0.25 - 0)^3 = 0.5026.$$

Рассмотрим точку 0.8, которая принадлежит четвертому отрезку, т.е. $i = 1$. Следовательно,

$$S(z) = a_4 + b_4(z - x_3) + \frac{1}{2}c_4(z - x_3)^2 + \frac{1}{6}d_4(z - x_3)^3,$$

$$S(0.8) = 1 + 6 \cdot (0.8 - 0.75) + \frac{1}{2} \cdot 0 \cdot (0.8 - 0.75)^2 +$$

$$+\frac{1}{6} \cdot (-192) \cdot (0.8 - 0.75)^3 = 1.026.$$

7.6. Полином Лагранжа

Решение ищем в виде $L_n(z) = \sum_{i=0}^N f_i l_i(z)$, где $l_i(z)$ – базисные полиномы N -й степени, для которых выполняется условие $l_i(x_k) = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & i \neq k \end{cases}$. Убедимся в том, что если такие полиномы построены, то $L_n(x)$ будет удовлетворять условиям интерполяции:

$$L_n(x_i) = \sum_{k=0}^N f_k l_k(x_i) = f_0 l_0(x_i) + f_1 l_1(x_i) + \dots + f_i l_i(x_i) + \dots + f_N l_N(x_i) = f_i.$$

Для построения базисного полинома определим:

$$l_i(z) = \frac{(z - x_0)(z - x_1) \dots (z - x_{i-1})(z - x_{i+1}) \dots (z - x_N)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_N)},$$

$i=0, 1, \dots, N$.

Легко понять, что

$$l_0(z) = \frac{(z - x_1)(z - x_2) \dots (z - x_N)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2) \dots (x_0 - x_N)},$$

$$l_1(z) = \frac{(z - x_0)(z - x_2) \dots (z - x_N)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2) \dots (x_1 - x_N)}$$

и т.д.

Функция $l_i(z)$ является полиномом N -й степени от z , и для нее выполняются условия "базисности":

$$l_i(x_k) = \frac{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{i-1})(x_k - x_{i+1}) \dots (x_k - x_N)}{(x_k - x_0)(x_k - x_1) \dots (x_k - x_{i-1})(x_k - x_{i+1}) \dots (x_k - x_N)} = 0, i \neq k,$$

т.е. $k = 1, \dots, i - 1$ или $k = i + 1, \dots, N$;

$$l_i(x_i) = \frac{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_N)}{(x_i - x_0)(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_N)} = 1.$$

Таким образом, нам удалось решить задачу о построении интерполирующего полинома N -й степени, и для этого не нужно решать СЛАУ. Полином Лагранжа можно записать в виде

$$L_N(z) = \sum_{i=0}^N f_i l_i(z) = \sum_{i=0}^N f_i \prod_{i \neq k} \frac{(z-x_k)}{(x_i-x_k)}.$$

Погрешность этой формулы можно оценить, если исходная функция $g(x)$ имеет производные до $N+1$ порядка:

$$r(z) = \frac{g^{(N+1)}(\xi)}{(N+1)!} \prod_{i=0}^{N+1} (z - x_i), \quad \xi \in [a, b].$$

Из этой формулы следует, что погрешность метода зависит от свойств функции $g(x)$, а также от расположения узлов интерполяции и точки z . Как показывают расчетные эксперименты, **полином Лагранжа имеет малую погрешность при небольших значениях $N < 20$** . При больших N погрешность начинает расти, что свидетельствует о том, что метод Лагранжа не сходится (т.е. его погрешность не убывает с ростом N).

Рассмотрим частные случаи. Пусть $N=1$, т.е. заданы значения функции только в двух точках. Тогда базовые полиномы имеют вид

$$l_0(z) = \frac{(z - x_1)}{(x_0 - x_1)}, \quad l_1(z) = \frac{(z - x_0)}{(x_1 - x_0)},$$

$$\begin{aligned} L_n(z) &= \sum_{i=0}^N f_i l_i(z) = f_0 l_0(z) + f_1 l_1(z) = f_0 \frac{(z - x_1)}{(x_0 - x_1)} + f_1 \frac{(z - x_0)}{(x_1 - x_0)} = \\ &= \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0} z + f_1 - \frac{f_1 - f_0}{x_1 - x_0}, \end{aligned}$$

т.е. получаем формулы кусочно-линейной интерполяции.

Пусть $N=2$. Тогда

$$\begin{aligned} l_0(z) &= \frac{(z - x_1)(z - x_2)}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)}, \quad l_1(z) = \frac{(z - x_0)(z - x_2)}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)}, \\ l_2(z) &= \frac{(z - x_0)(z - x_1)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} \end{aligned}$$

$$L_n(z) = \sum_{i=0}^N f_i l_i(z) = f_0 \frac{(z-x_1)(z-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f_1 \frac{(z-x_0)(z-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} + f_2 \frac{(z-x_0)(z-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)}.$$

В результате мы получили формулы так называемой **квадратичной или параболической интерполяции**.

Пример 7.4.

Заданы значения некоторой функции:

	0	2	3	3.5
	-1	0.2	0.5	0.8

Требуется найти значение функции при $z=1$, используя интерполяционный полином Лагранжа. Для этого случая $N=3$, т.е. полином Лагранжа имеет третий порядок. Вычислим значения базисных полиномов при $z=1$:

$$l_0(1) = \frac{(1-2)(1-3)(1-3.5)}{(0-2)(0-3)(0-3.5)} = \frac{(-1) \cdot (-2) \cdot (-2.5)}{(-2) \cdot (-3) \cdot (-3.5)} = \frac{-5}{-21} = 0.238,$$

$$l_1(1) = \frac{(1-0)(1-3)(1-3.5)}{(2-0)(2-3)(2-3.5)} = \frac{1 \cdot (-2) \cdot (-2.5)}{2 \cdot (-1) \cdot (-3.5)} = \frac{5}{3} = 1.667,$$

$$l_2(1) = \frac{(1-0)(1-2)(1-3.5)}{(3-0)(3-2)(3-3.5)} = \frac{1 \cdot (-1) \cdot (-2.5)}{3 \cdot 1 \cdot (-0.5)} = \frac{2.5}{-1.5} = -1.667,$$

$$l_3(1) = \frac{(1-0)(1-2)(1-3)}{(3.5-0)(3.5-2)(3.5-3)} = \frac{1 \cdot (-1) \cdot (-2)}{3.5 \cdot 1.5 \cdot 0.5} = \frac{2}{2.6258} = 0.762.$$

$$L_3(1) = \sum_{i=0}^3 f_i l_i(1) = (-1) \cdot 0.238 + 0.2 \cdot 1.667 + 0.5 \cdot (-1.667) + 0.8 \cdot 0.762 = -0.129.$$

7.7. Подбор эмпирических формул

При интерполировании функций мы использовали условие равенства значений интерполяционного полинома и данной функции в узлах интерполяции. Если же исходные данные получены в результате опытных измерений, то требование

точного совпадения не нужно, так как данные не получены точно. В этих случаях можно требовать лишь приближенного выполнения условий интерполяции $|F(x_j) - f(x_j)| < \varepsilon$. Это условие означает, что интерполирующая функция $F(x)$ проходит не точно через заданные точки, а в некоторой их окрестности, так, например, как это показано на рис. 7.4.

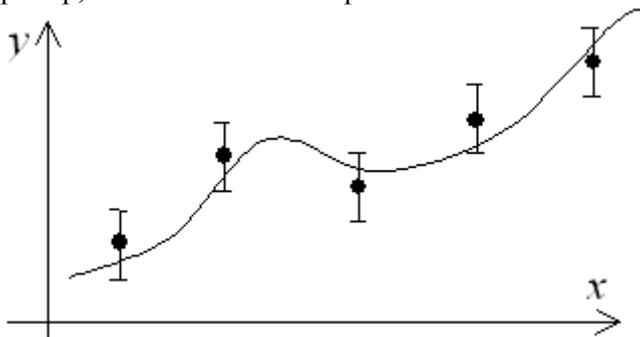


Рис. 7.4. Пример интерполирующей функции, не проходящей через заданные точки

Тогда говорят о **подборе эмпирических формул**. Построение эмпирической формулы состоит из двух этапов:

- 1) Подбор вида этой формулы $\varphi(x, a_0, a_1, \dots, a_m)$, содержащей неизвестные параметры a_0, a_1, \dots, a_m .
- 2) Определение наилучших в некотором смысле этих параметров.

Вид формулы иногда известен из физических соображений (для упругой среды – связь между напряжением и деформацией) или выбирается из геометрических соображений: экспериментальные точки наносятся на график и примерно угадывается общий вид зависимости путем сравнения полученной кривой с графиками известных функций. Успех здесь в значительной степени определяется опытом и интуицией исследователя.

Для практики важен случай аппроксимации функции многочленами, т.е. $F(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m$.

После того как выбран вид эмпирической зависимости, степень близости к эмпирическим данным определяют, используя **минимум суммы квадратов отклонений вычисленных и экспериментальных данных**.

Рассмотрим метод наименьших квадратов. Пусть для исходных данных $x_i, f_i, i=1, \dots, N$ (нумерацию лучше начинать с единицы) выбран вид эмпирической зависимости

$$y = \varphi(x, a_0, a_1, \dots, a_m)$$

с неизвестными коэффициентами a_0, a_1, \dots, a_m .

Запишем сумму квадратов отклонений между вычисленными по эмпирической формуле и заданными опытными данными:

$$S(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^N (\varphi(x_i, a_0, a_1, \dots, a_m) - f_i)^2.$$

Параметры a_0, a_1, \dots, a_m будем находить из условия минимума функции $S(a_0, a_1, \dots, a_m)$. В этом состоит **метод наименьших квадратов (МНК)**.

Известно, что в точке минимума все частные производные от S по a_0, a_1, \dots, a_m равны нулю:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 0, \frac{\partial S}{\partial a_1} = 0, \dots, \frac{\partial S}{\partial a_m} = 0. \quad (7.7)$$

Рассмотрим применение МНК для частного случая, широко используемого на практике. В качестве эмпирической функции рассмотрим полином

$$\varphi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m.$$

Формула для определения суммы квадратов отклонений примет вид

$$S(a_0, a_1, \dots, a_m) = \sum_{i=1}^N (a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_mx^m - f_i)^2. \quad (7.8)$$

Вычислим производные:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^N (a_0 + a_1x_i + \dots + a_mx_i^m - f_i),$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^N (a_0 + a_1x_i + \dots + a_mx_i^m - f_i)x_i,$$

.....

$$\frac{\partial S}{\partial a_m} = 2 \sum_{i=1}^N (a_0 + a_1x_i + \dots + a_mx_i^m - f_i)x_i^m.$$

Приравнявая эти выражения нулю и собирая коэффициенты при неизвестных a_0, a_1, \dots, a_m , получим следующую систему линейных уравнений:

$$\begin{aligned}
 Na_0 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^2 + \dots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^m &= \sum_{i=1}^N f_i, \\
 a_0 \sum_{i=1}^N x_i + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^3 + \dots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} &= \sum_{i=1}^N x_i f_i, \\
 \dots \dots \dots \\
 a_0 \sum_{i=1}^N x_i^m + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^{m+1} + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^{m+2} + \dots + a_m \sum_{i=1}^N x_i^{2m} &= \sum_{i=1}^N x_i^m f_i.
 \end{aligned}$$

Данная система уравнений называется **нормальной**. Решая эту систему линейных уравнений, получаем коэффициенты a_0, a_1, \dots, a_m .

В случае полинома первого порядка $m=1$, т.е. $\varphi(x) = a_0 + a_1x$, система нормальных уравнений примет вид

$$\begin{aligned}
 Na_0 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i &= \sum_{i=1}^N f_i, \\
 a_0 \sum_{i=1}^N x_i + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 &= \sum_{i=1}^N x_i f_i.
 \end{aligned}$$

При $m=2$ имеем

$$\begin{aligned}
 Na_0 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^2 &= \sum_{i=1}^N f_i, \\
 a_0 \sum_{i=1}^N x_i + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^3 &= \sum_{i=1}^N x_i f_i, \\
 a_0 \sum_{i=1}^N x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^N x_i^4 &= \sum_{i=1}^N x_i^2 f_i.
 \end{aligned}$$

Как правило, выбирают несколько эмпирических зависимостей. По МНК находят коэффициенты этих зависимостей и среди них наилучшую по минимальной сумме отклонений.

Пример 7.5.

Заданы координаты точек

	-5	-3.5	-2	1.5	3.25	5
	0.5	1.2	1.4	1.6	1.7	1.5

т.е. $N=6$.

Требуется найти эмпирические зависимости по методу МНК:

- линейную $\varphi(x) = a_0 + a_1x$;
- квадратичную $\varphi(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$;
- гиперболическую $\varphi(x) = a_0 + \frac{a_1}{x}$,

и выбрать среди них наилучшую по наименьшей сумме квадратов отклонений.

Система нормальных уравнений для линейной зависимости

$$Na_0 + a_1 \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N f_i,$$

$$a_0 \sum_{i=1}^N x_i + a_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N x_i f_i.$$

Учитывая, что $N=6$,

$$\sum_{i=1}^6 x_i = -0.75, \quad \sum_{i=1}^6 x_i^2 = 79.0625, \quad \sum_{i=1}^6 f_i = 7.9, \quad \sum_{i=1}^6 x_i f_i = 5.925,$$

получим

$$6a_0 - 0.75a_1 = 7.9,$$

$$-0.75a_0 + 79.0625a_1 = 5.925.$$

Решая систему линейных уравнений, получим $a_0 = 1.328$,
 $a_1 = 0.0875$.

Следовательно, линейная зависимость имеет вид $\varphi(x) =$
 $= 1.328 + 0.0875x$.

Вычислим сумму квадратов отклонений:

$$S_1 = \sum_{i=1}^6 (a_0 + a_1 x_i - f_i)^2 = 0.343.$$

Рассмотрим квадратичную зависимость. Система нормальных уравнений имеет вид

$$\begin{aligned} 6a_0 + a_1 \sum_{i=1}^6 x_i + a_2 \sum_{i=1}^6 x_i^2 &= \sum_{i=1}^6 f_i, \\ a_0 \sum_{i=1}^6 x_i + a_1 \sum_{i=1}^6 x_i^2 + a_2 \sum_{i=1}^6 x_i^3 &= \sum_{i=1}^6 x_i f_i, \\ a_0 \sum_{i=1}^6 x_i^2 + a_1 \sum_{i=1}^6 x_i^3 + a_2 \sum_{i=1}^6 x_i^4 &= \sum_{i=1}^6 x_i^2 f_i. \end{aligned}$$

Найдем неподсчитанные суммы:

$$\sum_{i=1}^6 x_i^3 = -13.172, \quad \sum_{i=1}^6 x_i^4 = 1532.69, \quad \sum_{i=1}^6 x_i^2 f_i = 91.856.$$

$$\begin{aligned} 6a_0 - 0.75a_1 + 79.0625 &= 7.9, \\ -0.75a_0 + 79.0625a_1 - 13.172a_2 &= 5.925, \\ 79.0625a_0 - 13.172a_1 + 1532.69a_2 &= 91.856. \end{aligned}$$

Решая СЛАУ, получим

$$a_0 = 1.65, \quad a_1 = 0.0865, \quad a_2 = -0.02436.$$

Следовательно, квадратичная зависимость имеет вид $\varphi(x) =$
 $= 1.65 + 0.0865x - 0.022436x^2$.

Вычислим сумму квадратов отклонений:

$$S_2 = \sum_{i=1}^6 (a_0 + a_1 x_i + a_2 x_i^2 - f_i)^2 = 0.052.$$

Выпишем систему нормальных уравнений для гиперболической зависимости. Согласно МНК, находим сумму квадратов отклонений:

$$S(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^N (a_0 + \frac{a_1}{x_i} - f_i)^2,$$

Составляем систему нормальных уравнений:

$$\frac{\partial S}{\partial a_0} = 2 \sum_{i=1}^N (a_0 + \frac{a_1}{x_i} - f_i) = 0,$$

$$\frac{\partial S}{\partial a_1} = 2 \sum_{i=1}^N (a_0 + \frac{a_1}{x_i} - f_i) \frac{1}{x_i} = 0.$$

или

$$6a_0 + a_1 \sum_{i=1}^6 \frac{1}{x_i} = \sum_{i=1}^6 f_i,$$

$$a_0 \sum_{i=1}^6 \frac{1}{x_i} + a_1 \sum_{i=1}^6 \frac{1}{x_i^2} = \sum_{i=1}^6 \frac{1}{x_i} f_i.$$

Учитывая, что

$$\sum_{i=1}^6 \frac{1}{x_i} = 0.1886, \sum_{i=1}^6 \frac{1}{x_i^2} = 107.16, \sum_{i=1}^6 \frac{1}{x_i} f_i = 0.747, \text{ получим}$$

$$a_0 = 1.3165, a_1 = 0.00465.$$

Сумма квадратов отклонений $S_3 = 0.886$.

Из трех зависимостей выбираем наилучшую, т.е. квадратичную.

Список рекомендуемой литературы

1. **Копченова, Н. В.** Вычислительная математика в примерах и задачах : учеб. пособие для вузов / Н. В. Копченова, И. А. Марон. – 3-е изд., стер. – СПб. : Лань, 2009.
2. **Марчук, Г.И.** Методы вычислительной математики: учеб. пособие / Г. И. Марчук. – 4-е изд., стер. – СПб. : Лань, 2009.
3. **Бахвалов, Н. С.** Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. – М. : Наука, 2003.
4. **Вержбицкий, В. М.** Основы численных методов / В. М. Вержбицкий. – М. : Высш. шк., 2002.
5. **Вержбицкий, В. М.** Численные методы (линейная алгебра и нелинейные уравнения) / В. М. Вержбицкий. – М. : ОНИКС 21 век, 2005.
6. **Вержбицкий, В. М.** Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения) / В. М. Вержбицкий. – М. : Высш. шк., 2001.
7. **Численные** методы [Электронный ресурс]. – Режим доступа:http://solidbase.karelia.ru/edu/meth_calc/files/vved.ed.shtm, свободный.
8. Введение в вычислительную математику [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.exponenta.ru/educat/class/courses/student/courses.asp>, свободный.
9. **Лабораторные** работы по курсу «Вычислительная математика» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://nsu.ru/matlab/Exponenta_RU/educat/systemat/amosova/lr.asp.htm, свободный.
10. **Основы** численных методов [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.tgspa.ru/info/education/faculties/ffi/ito/program/osn_chm/index.htm, свободный.

11. **Численные** методы [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://mathserfer.com/theory.php?tema=chmeth>, свободный.

Гнатюк Анна Борисовна
Залипаева Елена Анатолиевна
Мочалов Александр Сергеевич

Вычислительная математика

Курс лекций

Редактор Н.Б. Михалева

Подписано в печать 19.01.2017. Формат 60×84 1/16

Печать плоская. Усл. печ. л. 6,04. Уч.-изд. л.6,75.

Тираж 30. Заказ №17.

ФГБОУВО «Ивановский государственный энергетический
университет имени В.И. Ленина»

Отпечатано в УИУНЛ ИГЭУ

153003, г. Иваново, ул. Рабфаковская, 34.