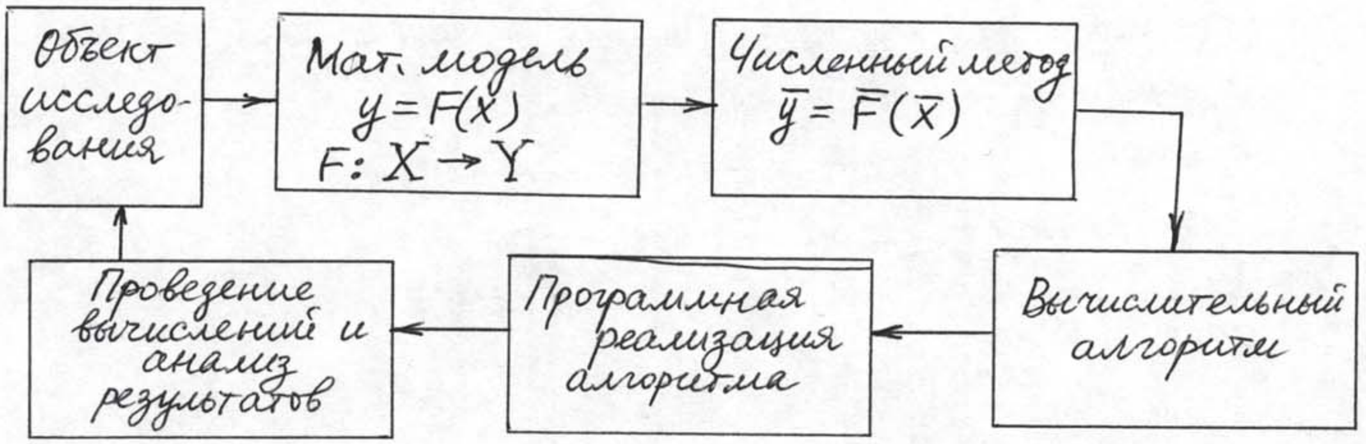
Введение в теорию вычислительных методов

1. Схема вычислительного эксперимента

Вычислительный эксперимент — это компьютерная технология исследования сложных проблем, основанная на анализе мат. моделей изучаемых объектов с использованием компьютерной техники.



Основу вычислительного эксперимента составляет триада „модель – алгоритм – программа“

Мат. модель формулируется на основе законов предметной области, управляющих объектом исследования, и может быть представлена в виде $y = F(x)$, где x – совокупность исходных данных, y – совокупность выходных данных, $x \in X$, $y \in Y$. Элементами множеств X, Y могут быть наборы чисел, наборы функций и т.д. В современной математике пространством наз. множество объектов любой природы, между которыми установлены соотношения, аналогичные соотношениям между точками трехмерного пространства. Если на некотором пространстве определено расстояние между его элементами (точками), то такое абстрактное множество наз. метрическим пространством. Совокупность исходных данных x и совокупность выходных данных y будем считать элементами (точками) метрических пространств X, Y.

Символом F обозначено отображение (функция, оператор) $X \to Y$, т.е. такое соответствие, которое каждому элементу $x \in X$ ставит в соответствие единственный элемент $y \in Y$.
Отображение F может задаваться решением сложной мат. задачи, например, граничной задачи для системы диф. уравнений, задачи решения системы нелинейных уравнений, системы интегральных уравнений и т.д.

Численный метод (вычислительный метод, приближенный метод) – это интерпретация мат. модели, доступная для компьютерной реализации.
Задача $y = F(x)$ приближенно заменяется задачей $\bar{y} = \bar{F}(\bar{x})$, т.е. отображение F заменяется близким отображением $\bar{F}$, исходные данные x заменяются близкими к ним данными $\bar{x}$, при этом полученное решение $\bar{y}$ должно быть близким к y. Близость понимается в смысле расстояния между элементами того или иного метрического пространства.

Отображение $\bar{F}$ должно быть таким, чтобы $\forall x \in X$ можно было найти $\bar{F}(x)$ в результате выполнения <u>вычислительного алгоритма</u>, состоящего из конечного числа операций. Например, диф. уравнение может приближенно заменено разностным уравнением (дискретной моделью).

2. Структура погрешности

Существуют четыре источника погрешности результата: мат. модель, исходные данные, приближенный метод, округления при вычислениях. В соответствии с этим различают четыре вида погрешности:

1) <u>погрешность мат. модели</u>, которая является следствием несоответствия мат. описания реальному объекту (например, из-за упрощений, внесенных при мат. описании объекта);
2) <u>неустранимая погрешность</u>, которая является следствием неточности задания числовых данных, входящих в мат. описание задачи;
3) <u>погрешность метода</u>, которая возникает при замене отображения F отображением $\bar{F}$ (например, интеграл заменяют суммой, производную – разностью, функцию – многочленом, строят бесконечный итерационный процесс, который обрывается после конечного числа шагов);
4) <u>вычислительная погрешность</u> (погрешность округления), которая накапливается в ходе выполнения вычислительного алгоритма.

3. Корректность задачи. Устойчивость вычислительного алгоритма.

Задача $y = F(x)$ наз. корректной (корректно поставленной), если для любых входных данных $x \in X$ решение $y \in Y$ существует, единственно и устойчиво по входным данным. Под устойчивостью понимается непрерывность решения по входным данным, т.е. малым изменениям входных данных соответствуют малые отклонения решения.

Вычислительный алгоритм наз. устойчивым, если в процессе его выполнения вычислительная погрешность возрастает незначительно (не накапливаются ошибки округления). Даже в случае корректно поставленной задачи вычислительный алгоритм может оказаться неустойчивым.

4. Абсолютная и относительная погрешности

Пусть x_* – точное значение некоторой величины, x – известное приближение к точному значению. Число $\Delta(x)$ наз. абсолютной погрешностью приближенного значения x, если

$$|x - x_*| \le \Delta(x).$$

Число $\delta(x)$ наз. относительной погрешностью приближенного значения x, если

$$\left| \frac{x - x_*}{x} \right| \le \delta(x).$$

Запись $\quad x_* = x \pm \Delta(x), \quad x_* = x(1 \pm \delta(x))$

означает, что x есть приближенное значение для x_* с абс. погрешностью $\Delta(x)$ и относительной погрешностью $\delta(x)$.

Значащими цифрами наз. все цифры в десятичной записи числа, начиная с первой ненулевой слева. Значащую цифру наз. верной, если абсолютная погрешность числа не превосходит единицы разряда, соответствующего этой цифре. Результаты приближенных вычислений нужно представлять только с верными значащими цифрами. Например, запись

$x = 1,467$ означает $x = 1,467 \pm 0,001$,

$x = 1,4670$ означает $x = 1,4670 \pm 0,0001$.

Численное решение нелинейных уравнений

1. Постановка задачи. Отделение корней.

Пусть $f(x)$ – действительная функция, заданная на отрезке $a \le x \le b$. Функция $f(x)$ предполагается непрерывной на этом отрезке, в некоторых случаях понадобится существование непрерывной производной $f'(x)$ или даже существование $f''(x)$. Ставится задача определения нулей функции $f(x)$, т.е. задача решения уравнения

$$f(x) = 0, \quad a \le x \le b.$$

Корни уравнения считаются изолированными, т.е. для каждого корня существует окрестность, не содержащая других корней.

Приближенное определение корней уравнения разбивается на два этапа:

1) отделение корней, т.е. нахождение промежутков $[a_i, b_i]$, $i = 1, 2, \dots, i_0$, каждый из которых содержит только один корень;
2) уточнение корней, т.е. определение каждого корня с заданной точностью ε.

Отделение корней основано на известной теореме анализа (теорема Коши или Больцано–Коши): если функция $f(x)$ непрерывна на отрезке $a \le x \le b$ и принимает на его концах значения разных знаков $f(a)f(b) < 0$, то на интервале $a < x < b$ существует по крайней мере одна точка x_*, в которой $f(x_*) = 0$.

Корень x_* заведомо будет единственным, если производная $f'(x)$ знакопостоянна на интервале $a < x < b$. В случае, когда $f(x)$ является многочленом, существуют другие теоремы, облегчающие отделение корней.

<u>Алгоритм отделения корней</u>. Вычисляются значения $f(x)$ в заданных точках x_i: $a = x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_i < x_{i+1} < \dots < x_{i_0} = b$. Если $f(x_i)f(x_{i+1}) < 0$, то на интервале $x_i < x < x_{i+1}$ имеется нечетное число корней. Разбивая этот интервал на более мелкие, можно отделить корни.

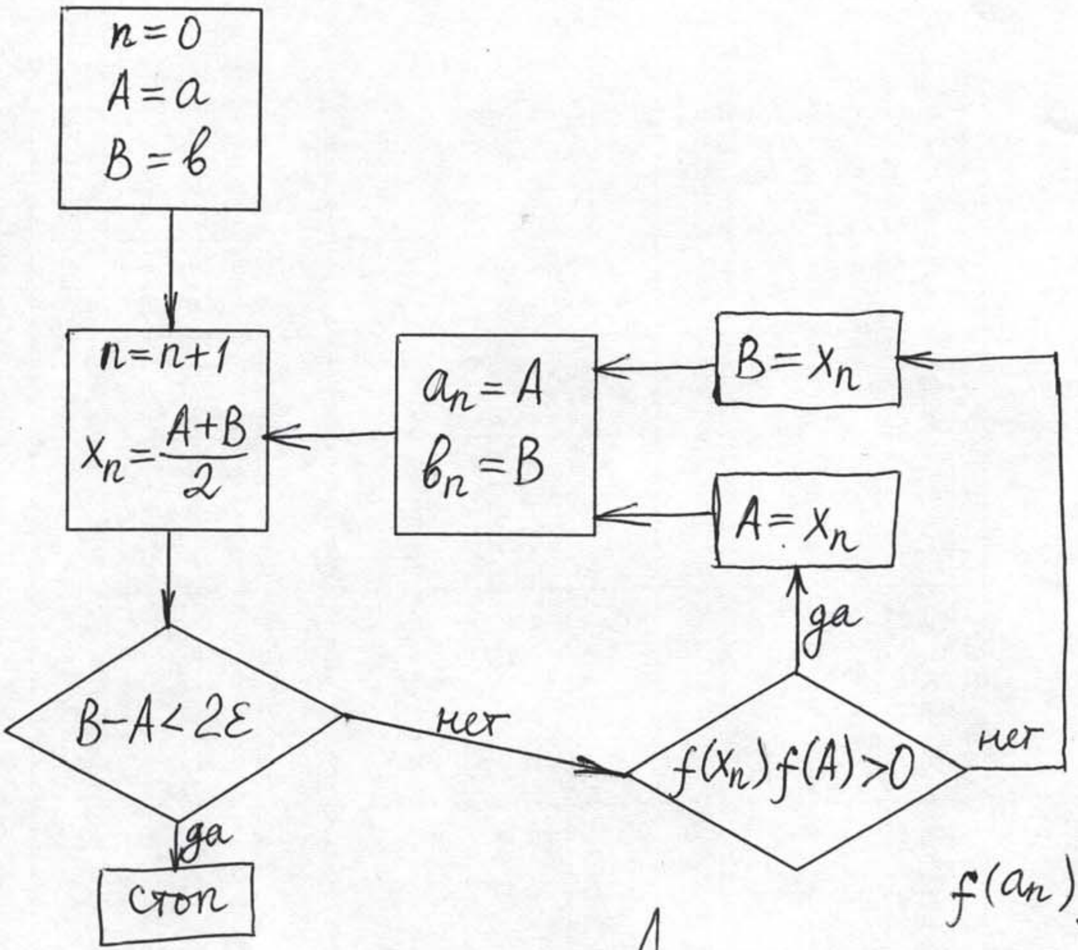
Для отделения корней можно также использовать алгоритм половинного деления (бисекции, дихотомии), который будет рассмотрен дальше.

Для уточнения корней применяется какой-либо итерационный процесс, некоторые из которых мы изучим далее.

2. Метод половинного деления

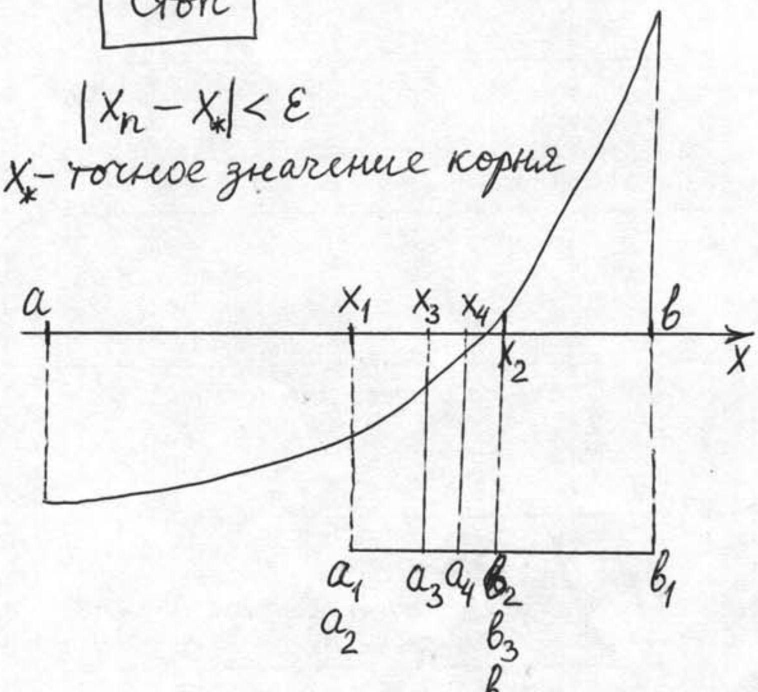
Рассматривается уравнение $f(x)=0$, $a \le x \le b$, функция $f(x)$ непрерывна на этом отрезке, $f(a)f(b)<0$.

Алгоритм метода половинного деления (бисекции, дихотомии)



$|x_n - x_*| < \varepsilon$

x_* – точное значение корня



$$f(a_n)f(b_n)<0$$

$$a_n < x_{n+1} < b_n$$

$$b_n - a_n = \frac{b-a}{2^n}$$

$$\lim_{n\to\infty}(b_n - a_n) = 0$$

$$\lim_{n\to\infty} x_n = x_*, \quad f(x_*)=0$$

$$|x_{n+1} - x_*| \le \frac{1}{2}|x_n - x_*|$$

$$\lim_{n\to\infty}\frac{|x_{n+1}-x_*|}{|x_n - x_*|} = q \le \frac{1}{2}$$

$$|x_{n+1} - x_*| = O(|x_n - x_*|)$$

В результате получаем систему вложенных отрезков $[a_n, b_n]$, $[a_{n+1}, b_{n+1}] \subset [a_n, b_n]$, длины которых $b_n - a_n = \frac{b-a}{2^n} \to 0$, x_{n+1} – середина отрезка $[a_n, b_n]$. Согласно лемме о вложенных отрезках эта система отрезков имеет непустое пересечение, состоящее из единственной точки x_*, которая и является корнем уравнения, $x_* = \lim\limits_{n\to\infty} x_n$.

Так как $x_n, x \in [a_{n-1}, b_{n-1}]$, а длина отрезка $[a_n, b_n]$ на каждом шаге итерационного процесса уменьшается вдвое, то погрешности двух последовательных приближений связаны неравенством $|x_{n+1} - x_*| \le \frac{1}{2}|x_n - x_*|$, откуда

$$\lim_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - x_*|}{|x_n - x_*|} = q > 0, \text{ т.е. } |x_{n+1} - x_*| = O(|x_n - x_*|),$$

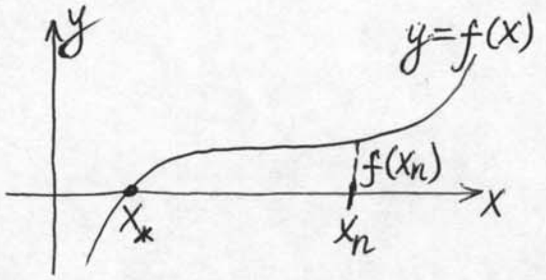
погрешности двух последовательных приближений являются величинами одного порядка. В этом случае говорят, что итерационный процесс обладает линейной сходимостью (сходимостью первого порядка). Если же погрешности двух последовательных приближений некоторого итерационного процесса удовлетворяют условию $\lim\limits_{n\to\infty} \frac{|x_{n+1} - x_*|}{|x_n - x_*|^k} = q > 0$, то говорят, что итерационный процесс имеет сходимость порядка k.

Замечание. Если на отрезке $[a, b]$ имеется несколько корней, то итерационный процесс половинного деления сойдется к одному из корней.

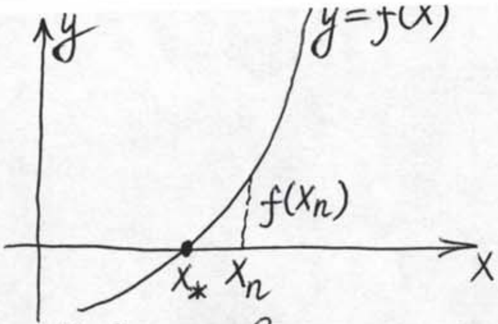
Выводы. Метод половинного деления прост и очень надежен, к простому корню он сходится для любых непрерывных функций $f(x)$, в том числе и недифференцируемых. Однако скорость сходимости невелика: за одну итерацию точность увеличивается примерно вдвое. На системы нелинейных уравнений этот метод не обобщается.

Метод половинного деления применяется в случаях, когда требуется высокая надежность счета, а скорость сходимости малосущественна.

Замечание о невязке. Пусть x_n – приближенное значение корня уравнения $f(x) = 0$. Величина $|f(x_n)|$ наз. невязкой. Делать выводы о точности приближения x_n на основе анализа малости невязки $|f(x_n)|$ неправомерно.



Невязка мала, но x_n значительно отличается от корня x_*



Невязка велика, но x_n достаточно близко к корню x_*

Не следует также забывать, что уравнение $f(x)=0$ равносильно уравнению $Kf(x)=0$, где K – произвольное число, $K\neq 0$. За счет выбора множителя K величину $|Kf(x_n)|$ можно сделать сколь угодно большой или сколь угодно малой.

3. Метод простой итерации

Рассмотрим уравнение $x=\varphi(x)$, где функция $\varphi(x)$ задает отображение отрезка $a\le x\le b$ в себя. Это отображение является сжимающим, если $\exists q\in(0,1)$:

$$|\varphi(x)-\varphi(y)|\le q|x-y| \ \forall\, x,y\in[a,b].$$

Последнее условие выполняется, если $\varphi(x)$ имеет на $[a,b]$ производную $\varphi'(x)$, удовлетворяющую неравенству

$$|\varphi'(x)|\le q<1 \ \forall\, x\in[a,b].$$

(этот вывод сразу же вытекает из формулы Лагранжа о конечном приращении). Корень x_* уравнения $x=\varphi(x)$ представляет собой неподвижную точку отображения $\varphi(x)$.

Метод простой итерации заключается в построении последовательности $x_{n+1}=\varphi(x_n)$, $n=0,1,2,\ldots$, $x_0\in[a,b]$.

В теории метрических пространств доказывается принцип сжимающих отображений (теорема о неподвижной точке), согласно которому при выполнении условия

$$|\varphi'(x)|\le q<1 \ \forall\, x\in[a,b]$$

уравнение $x=\varphi(x)$ имеет на отрезке $a\le x\le b$ единственный корень $x_*=\varphi(x_*)$, последовательность x_n сходится к этому корню $x_*=\lim\limits_{n\to\infty}x_n$, а для погрешности n-го приближения справедливы оценки $|x_n-x_*|\le\dfrac{q^n}{1-q}|x_1-x_0|$, $|x_{n+1}-x_n|\le q^n|x_1-x_0|$,

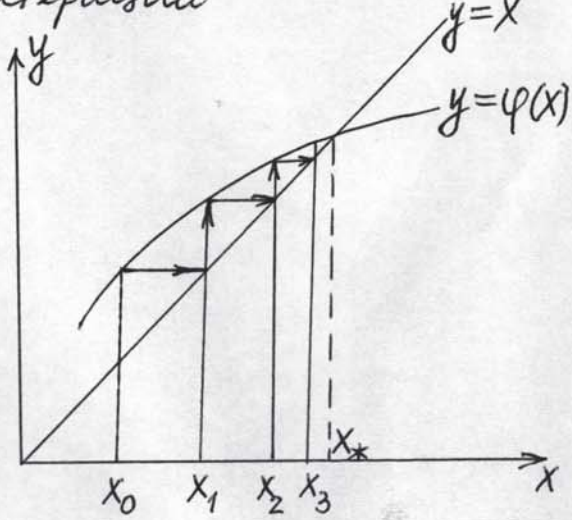
в качестве начального приближения может быть выбрана любая точка $x_0\in[a,b]$.

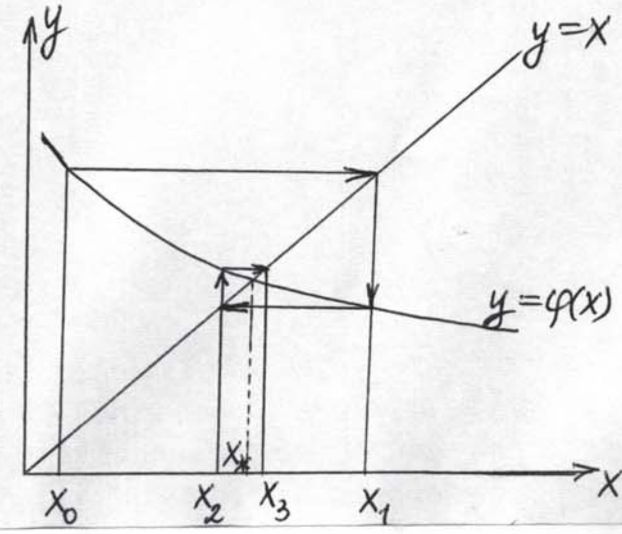
Так как $x_{n+1}-x_* = \varphi(x_n)-\varphi(x_*) = \varphi'(\xi)(x_n-x_*)$, $\xi \in (x_n, x_*)$, то

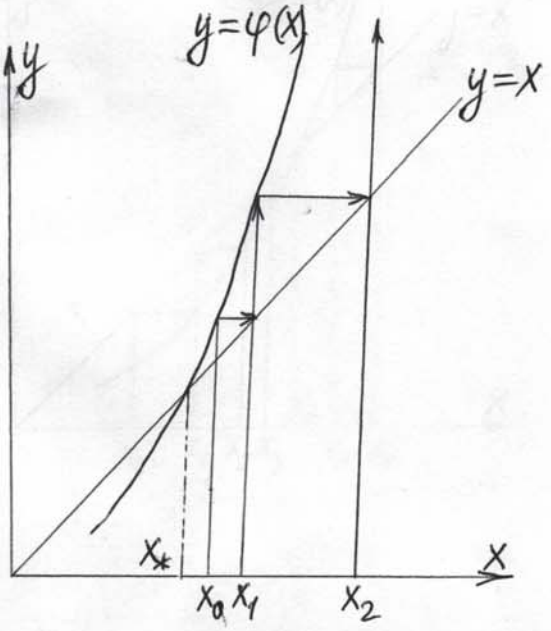
$$|x_{n+1}-x_*| \le q\,|x_n-x_*|, \quad |x_n-x_*| \le q^n\,|x_0-x_*|,$$

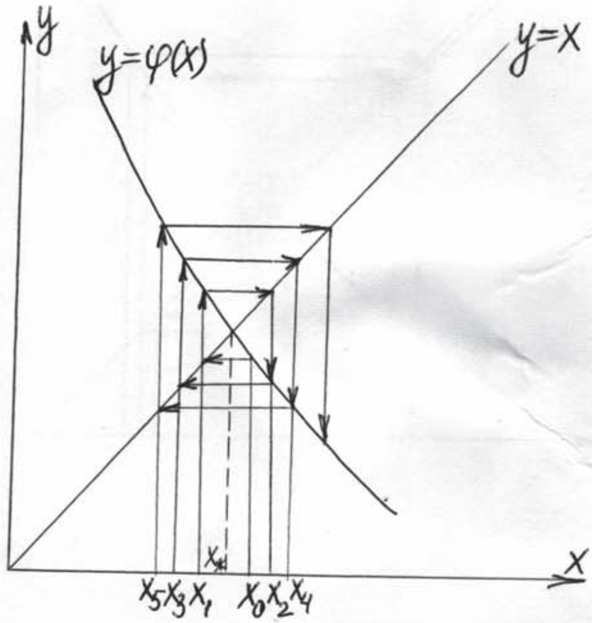
т.е. метод простой итерации сходится линейно со скоростью геометрической прогрессии с знаменателем q.

Графическая иллюстрация сходимости метода простой итерации









<u>Пример.</u> Алгоритм вычисления $\sqrt{a}$ реализуют как метод простой итерации для уравнения $x^2 = a$, $x > 0$, которое можно представить в двух эквивалентных видах: $x = \frac{a}{x}$, $x = \frac{1}{2}\left(x + \frac{a}{x}\right)$.

Итерационная схема $x_{n+1} = \frac{a}{x_n}$ расходится, а схема $x_{n+1} = \frac{1}{2}\left(x_n + \frac{a}{x_n}\right)$ оказывается очень эффективной.

Приведение уравнения к виду, пригодному для итерирования

Рассмотрим уравнение $f(x)=0$, $a\le x\le b$, предполагая, что $f(x)$ имеет на этом отрезке знакопостоянную производную: $\operatorname{sign} f'(x)=k\ \ \forall x\in[a,b]$, $0<m\le|f'(x)|\le M$.

Уравнение $f(x)=0$ равносильно уравнению $x=\varphi(x)$, где $\varphi(x)=x-\tau k f(x)$, τ – положительный параметр.

Тогда $\varphi'(x)=1-\tau k f'(x)=1-\tau|f'(x)|$, $\quad 1-\tau M\le|\varphi'(x)|\le 1-\tau m$,

и выбирая параметр τ достаточно малым, можно добиться выполнения условия $|\varphi'(x)|<1$, обеспечивающего сходимость итерационного процесса $x_{n+1}=\varphi(x_n)$ при любом начальном приближении x_0. Например, можно выбрать $\tau=\frac{1}{M}$.

Более общий способ выбора функции $\varphi(x)$:

$$\varphi(x)=x+\tau(x)f(x),\ \text{где } \tau(x) \text{ знакопостоянна на } [a,b].$$

Важное достоинство метода простой итерации заключается в отсутствии накопления ошибок округления. Ошибка вычислений эквивалентна только некоторому ухудшению очередного приближения. Поэтому метод простой итерации является одним из наиболее надежных.

Метод простой итерации обобщается на системы нелинейных уравнений.

4. Метод Ньютона (метод касательных, метод линеаризации)

Пусть x_n – некоторое приближение к корню уравнения $f(x)=0$. Запишем уравнение касательной к графику $y=f(x)$ в точке x_n

$$y=f'(x_n)(x-x_n)+f(x_n)$$

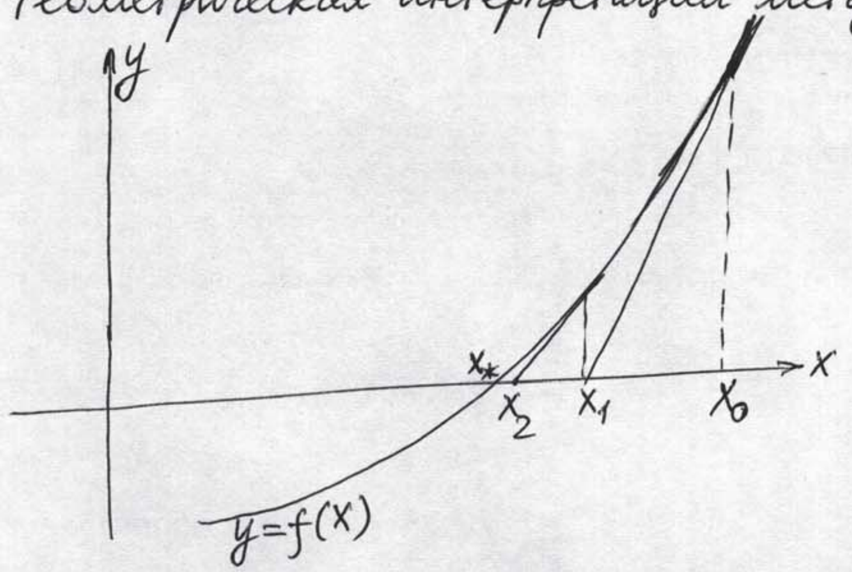
и выберем в качестве следующего приближения x_{n+1} абсциссу точки пересечения касательной с осью абсцисс:

$$0=f'(x_n)(x_{n+1}-x_n)+f(x_n).$$

В результате получим итерационный процесс метода Ньютона:

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}.$$

Геометрическая интерпретация метода Ньютона



Метод Ньютона можно рассматривать как частный случай метода простой итерации $x_{n+1}=\varphi(x_n)$, $\varphi(x)=x-\frac{f(x)}{f'(x)}$.

Считая $f(x)$ дважды непрерывно дифференцируемой, получим:

$$\varphi'(x)=\frac{f(x)f''(x)}{f'^2(x)}.$$

Таким образом, итерационный процесс сходится при произвольном нулевом приближении x_0, если всюду на рассматриваемом отрезке $|f(x)f''(x)|<f'^2(x)$.

Если x_* – корень кратности p уравнения $f(x)=0$, то в окрестности точки x_* $f(x)=O((x-x_*)^p)$, а

$$\varphi'(x)=O\left(\frac{(x-x_*)^p\,p(p-1)(x-x_*)^{p-2}}{p^2(x-x_*)^{2p-2}}\right)=O\left(\frac{p-1}{p}\right).$$

Поэтому всегда найдется некоторая окрестность корня x_*, в которой $|\varphi'(x)|<1$, и итерационный процесс будет сходиться при выборе начального приближения из этой окрестности, т.е. если начальное приближение выбрано достаточно близким к корню

Геометрическая интерпретация указывает еще одно достаточное условие сходимости итераций метода Ньютона: начальное приближение x_0 следует выбрать с той стороны от корня, где выполняется условие $f(x)f''(x)\geq 0$. В этом случае $x_n \to x_*$ монотонно.

В случае простого корня x_* $\varphi'(x_*)=0$. За счет этого увеличивается порядок сходимости: в случае простого корня метод Ньютона имеет квадратичную сходимость. Действительно,

$$x_{n+1}-x_* = \varphi(x_n)-\varphi(x_*) = \frac{1}{2}\varphi''(\xi)(x_n-x_*)^2, \quad \xi\in(x_n, x_*),$$

т.е. $x_{n+1}-x_* = O((x_n-x_*)^2)$. В случае кратного корня сходимость метода остается линейной.

<u>Выводы</u>. Метод Ньютона целесообразно использовать, если имеются эффективные алгоритмы вычисления производной $f'(x)$ и известны разумные начальные приближения для корней. Преимущество метода – квадратичная сходимость, недостаток – необходимость вычисления на каждой итерации не только $f(x_n)$, но и $f'(x_n)$. В случае кратного корня $f'(x)$ вблизи от него становится малой, поэтому отношение $\frac{f(x)}{f'(x)}$ нужно вычислять аккуратно во избежание потери точности.

В случаях, когда требуется избежать вычисления производной на каждой итерации, используется <u>модифицированный метод Ньютона</u>:
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_0)}.$$

Этот метод предъявляет меньше требований к выбору начального приближения ($f'(x_0)\neq 0$), однако обладает только линейной сходимостью.

Метод Ньютона, так же как и метод простой итерации, допускает обобщение на случай систем нелинейных уравнений.

5. Метод секущих

Методы простой итерации и Ньютона являются одношаговыми: для вычисления x_{n+1} требуется только значение x_n на предыдущей итерации. Метод секущих является двухшаговым: для вычисления очередного приближения нужно знать два предыдущих.

В методе секущих за x_{n+1} принимается абсцисса точки пересечения с осью абсцисс прямой, проведенной через точки $(x_{n-1}, f(x_{n-1}))$, $(x_n, f(x_n))$. Уравнение этой прямой

$$\frac{y-f(x_n)}{x-x_n} = \frac{f(x_n)-f(x_{n-1})}{x_n-x_{n-1}},$$

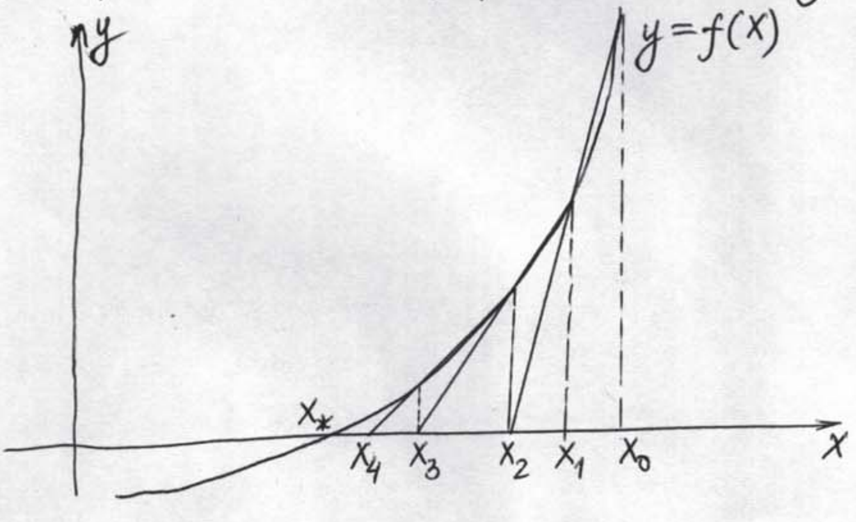
поэтому

$$x_{n+1}-x_n = -f(x_n)\frac{x_n-x_{n-1}}{f(x_n)-f(x_{n-1})}.$$

Итерации метода секущих строятся по правилу:

$$x_{n+1} = x_n - f(x_n)\frac{x_n-x_{n-1}}{f(x_n)-f(x_{n-1})}.$$

Геометрическая интерпретация метода секущих



Для оценки скорости сходимости метода секущих разложим $f(x_n)$, $f(x_{n-1})$ в ряд Тейлора в окрестности корня x_*. С точностью до малых более высокого порядка получим:

$$x_{n+1}-x_* = x_n-x_* - \left(f'(x_*)(x_n-x_*)+\frac{1}{2}f''(x_*)(x_n-x_*)^2\right)\frac{x_n-x_{n-1}}{f'(x_*)(x_n-x_{n-1})+\frac{1}{2}f''(x_*)\left((x_n-x_*)^2-(x_{n-1}-x_*)^2\right)}$$

$$x_{n+1}-x_* = (x_n-x_*)\left(1-\frac{1+a(x_n-x_*)}{1+a(x_n-x_*+x_{n-1}-x_*)}\right), \quad a=\frac{f''(x_*)}{2f'(x_*)},$$

$$x_{n+1}-x_* = (x_n - x_*)\,\frac{a(x_{n-1}-x_*)}{1+a(x_n-x_*+x_{n-1}-x_*)},$$

откуда после отбрасывания малых более высокого порядка окончательно получаем:

$$x_{n+1}-x_* = a(x_n-x_*)(x_{n-1}-x_*).$$

Решение этого рекуррентного уравнения разыскивается в виде

$$x_{n+1}-x_* = a^{\alpha}(x_n-x_*)^{\beta},$$

где α, β – постоянные, подлежащие определению. После подстановки в уравнение получаем:

$$a^{\alpha}\left(a^{\alpha}(x_{n-1}-x_*)^{\beta}\right)^{\beta} = a\,a^{\alpha}(x_{n-1}-x_*)^{\beta+1},$$

$$a^{\alpha\beta}(x_{n-1}-x_*)^{\beta^2} = a(x_{n-1}-x_*)^{\beta+1}.$$

Таким образом, значения α, β определяются уравнениями:

$$\alpha\beta = 1, \quad \beta^2-\beta-1=0.$$

Сходящемуся процессу соответствует только положительный корень квадратного уравнения $\beta = \frac{\sqrt{5}+1}{2} \approx 1{,}62.$

Итак,

$$x_{n+1}-x_* = O\left((x_n-x_*)^{\beta}\right),$$

т.е. порядок сходимости метода секущих равен β, $1<\beta<2$. Метод секущих сходится медленнее, чем метод Ньютона, однако он не требует вычисления производной на каждой итерации. Поэтому метод секущих при одинаковом с методом Ньютона объеме вычислений позволяет сделать вдвое больше итераций и получить более высокую точность.

Вблизи корня уравнения, особенно корня высокой кратности, знаменатель дроби в итерационном правиле метода секущих становится весьма малым. Возникает потеря верных значащих цифр, приводящая к „разболтке" счета. Это ограничивает точность, с которой можно найти корень.

От „разболтки" счета страхуются при помощи приема Гарвика. Выбирают не очень малое ε, ведут итерации до выполнения условия $|x_{n+1}-x_n|<\varepsilon$, а затем продолжают расчет до тех пор, пока $|x_{n+1}-x_n|$ убывают. Первое возрастание означает начало „разболтки", тогда расчет прекращают и последнюю итерацию не используют.