

Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
«Гомельский государственный технический университет имени
П.О. Сухого»

Факультет автоматизированных и информационных систем

Кафедра «Информационные технологии»

В.В. Комраков

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

КУРС ЛЕКЦИЙ

по одноименной дисциплине для студентов специальности
1-40 01 02 Информационные системы и технологии (по направлениям)

Гомель 2013

СОДЕРЖАНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	4
1 ВВЕДЕНИЕ В ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ	5
2. РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	10
2.1. Основные определения алгебры матриц	10
2.2. Точные методы решения систем линейных уравнений	12
2.2.1 Метод Гаусса	12
2.2.2 Метод исключения Жордана – Гаусса или полного исключения	14
2.2.3 Методы разложения матрицы коэффициентов системы линейных уравнений на подматрицы	15
2.2.4 Метод ортогонализации	18
2.2.5 Метод прогонки	19
2.3. Приближенные методы решения систем линейных уравнений	21
2.3.1 Метод итерации	21
2.3.2 Метод Зейделя	22
3 АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИЙ	25
3.1 Интерполирование функций	25
3.1.1 Канонический полином	26
3.1.2 Полином Ньютона	27
3.1.3 Полином Лагранжа	30
3.2 Метод наименьших квадратов	32
3.2.1 Подбор параметров экспериментальной зависимости методом наименьших квадратов	32
3.2.2. Подбор коэффициентов линейной зависимости	34
3.2.3 Подбор коэффициентов полинома k -й степени	35
4 ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ И ИНТЕГРИРОВАНИЕ	37
4.1 Численное интегрирование	37
4.1.1 Интегрирование по методу прямоугольников	37
4.1.2 Интегрирование по методу трапеций	40
4.1.3 Интегрирование по методу Симпсона	42
4.1.4 Квадратурные формулы Гаусса	44
4.2 Численное дифференцирование	45
5. РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	48
5.1 Локализация (отделение) корней	48
5.2 Метод половинного деления (дихотомии)	51
5.3 Метод хорд (пропорциональных частей)	53
5.4 Метод касательных (метод Ньютона)	55
5.5 Метод простой итерации (последовательных приближений)	59
5.6 Вычисление комплексных корней (метод Вестгейна)	62
5.7 Метод парабол (метод Мюллера)	63

6 РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ	65
6.1 Общие сведения о дифференциальных уравнениях	65
6.2 Решение дифференциальных уравнений методом Эйлера	66
6.3 Решение дифференциальных уравнений при помощи модифицированного метода Эйлера.....	68
6.4 Решение дифференциальных уравнений методами Рунге-Кутты.....	69
6.4.1 Метод Рунге-Кутты первого порядка	69
6.4.2 Методы Рунге-Кутты второго порядка	69
6.4.3 Метод Рунге-Кутты четвертого порядка	70
6.4.4 Метод Кутта-Мерсона четвертого порядка	70
6.5 Решение дифференциальных уравнений методом прогноза-коррекции Адамса.....	72
6.6 Решение дифференциальных уравнений методом Милна	73
7 МЕТОД СЕТОК ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ.....	75
7.1 Общие сведения о дифференциальных уравнениях в частных производных	75
7.2 Использование метода сеток для решения уравнениях в частных производных	77
8 РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ДИФФУЗИИ.....	79
8.1 Явная двухслойная разностная схема	80
8.2 Неявная разностная схема	82
8.3 Шеститочечная параметрическая схема	83
8.4 Схема Франкела-Дюфорта	84
8.5 Схема Ричардсона	85
8.6 Схема Алена-Чена	85
8.7 Нецентральная явная схема.....	86
8.8 Схема Саульева.....	87
8.9 Точные решения тестовых краевых задач для одномерного линейного уравнения теплопроводности.....	88
9 РЕШЕНИЕ ДВУХМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА	90
9.1. Использование метода сеток для решения одномерного волнового уравнения.....	90
9.2. Использование метода сеток для решения одномерного уравнения Пуассона	91
ЛИТЕРАТУРА	93

ВВЕДЕНИЕ

Численный эксперимент является неотъемлемой частью математического моделирования. Чаще всего «образом» реальных процессов и явлений различной природы становятся системы нелинейных уравнений в частных производных, анализ которых представляет значительные трудности. На этом этапе исследователю приходится обращаться к научной литературе. На сегодняшний день существуют многочисленные исчерпывающие монографии и учебники, в которых со всей полнотой и строгостью описаны теоретические и практические стороны численных методов, однако, вопросы остаются даже после их прочтения. Поэтому в этой работе ставится цель хотя бы частично преодолеть трудности практического использования численных методов. Вместе с кратким изложением теоретического материала приводятся блок-схемы алгоритмов, достаточно подробные для реализации в различных математических пакетах или с помощью различных языков программирования.

1 ВВЕДЕНИЕ В ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

Первые опубликованные теоретические исследования по механике упругих тел, очевидно, принадлежат Галилею; его знаменитая книга «Беседы и математические доказательства, касающиеся двух новых отраслей науки, относящихся к механике и местному движению» была издана в 1638 году.

Первая публикация о нелинейной зависимости между напряжениями и деформациями сделана Бюльфингером в трудах Российской академии наук в 1729 году.

Большой вклад в развитие методов теории упругости внесли русские учёные: Н.И. Безухов, И.Г. Б.Г. Галёркин, А.А. Ильюшин, Л.М. Качанов, С.Г. Лехницкий, В.В. Новожилов, С.И. Работнов, А.Р. Ржаницин, С.П. Тимошенко, М.М. Филоненко-Бородич, и другие.

Значительный вклад в разработку и развитие методов исследования напряжённо-деформированного состояния деформируемых твёрдых тел различной природы и свойств внесли и современные учёные Беларуси: В.Н. Абрашин, А.А. Борисевич, С.В. Босаков, Ю.В. Василевич, М.А. Журавков, М.Д. Мартыненко, Ю.М. Плескачевский, И.А. Прусов и другие.

В общем случае под системой понимают конечное множество *элементов* и *связей* между ними и между их *свойствами*, действующими как целостное образование для достижения единой цели.

Элементом называется некоторый объект (материальный, информационный и др.), обладающий рядом определённых свойств, но внутреннее строение (содержание) которого безотносительно к цели рассмотрения.

Связью называют важный для целей рассмотрения обмен между элементами веществом, энергией, информацией, т.е. фактор, связывающий элементы и их свойства в единое целое. Связи позволяют посредством переходов от элемента к элементу соединить два любых элемента совокупности.

Свойства – это качества параметров объектов, они могут изменяться в результате действия системы. Свойства дают возможность описывать объекты системы количественно.

Любая система характеризуется двумя признаками:

1. связностью, т.е. наличием связи между элементами;
2. функцией, суть этого качества в том, что свойства системы отличаются от свойств отдельных её элементов.

В задачах механики деформируемого твёрдого тела системы содержат элементы разных типов и обладают разнородными связями между ними. Такие системы называют сложными или большими и сложными, в зависимости от количества элементов и их содержания. Сложные системы имеют ряд характерных особенностей. Основными из них являются: уникальность, слабая структурированность теоретических и фактических знаний о системе, составной характер системы, разнородность подсистем и элементов системы; большая размерность системы. Всякая система существует в некоторой окружающей среде, обуславливается ею и имеет свою границу. Говорят, что система действует внутри её. Для конкретной системы окружающая среда есть совокупность всех объектов, изменение свойств которых влияет на систему, а также тех объектов, свойства которых меняются в результате поведения системы. Отсюда следует, что разделение пространства на две совокупности – система и окружающая среда – несколько условно и может носить субъективный характер [1,2].

Главными отличительными чертами сложной системы является её целенаправленный характер (цель функционирования), структурное представление, т.е. наличие выделяемых частей (подсистем) и вероятностный характер её взаимодействия с внешней средой. Выделяемые части системы могут иметь материальную, функциональную, алгоритмическую и другую основу. Между выделяемыми частями всегда устанавливается связь. Такое разделение системы с указанием связей между выделяемыми частями даёт представление о системе в целом и на время изучения системы сохраняется неизменным. Близким к понятию структуры является термин «декомпозиция».

Декомпозицией называется деление системы на части, удобное для каких-либо операций с этой системой. Важнейшим стимулом и сутью декомпозиции является упрощение системы, слишком сложной для рассмотрения целиком. Такое упрощение может:

1. фактически приводить к замене системы на некоторую другую, в каком-то смысле соответствующую исходной. Это делается вводом гипотез об отбрасывании или ослаблении отдельных связей в системе;

2. полностью соответствовать исходной системе и при этом облегчать работу с ней - такая декомпозиция, называемая строгой, требует специальных процедур согласования.

Группа элементов системы, описываемая только своими входами и выходами и обладающая определенной целостностью, называется

ся *модулем*. Система может представляться набором модулей и сама рассматриваться как модуль. Модульное построение системы, как правило, определяет ее декомпозицию. Нередко оно определяет и структуру. Любой элемент системы обладает рядом свойств. В процессе функционирования системы могут измениться свойства и характеристики группы элементов, модуля и системы в целом. Зафиксируем все значения характеристик в системе, важных для целей рассмотрения. Такую ситуацию назовем *состоянием системы*. Пусть хотя бы одна такая характеристика изменилась. Это будет новое состояние системы. Аналогично можно рассматривать третье и т.д. состояния, т.е. их набор. Но *набор состояний это еще не процесс*. Пусть выбран некоторый физический параметр (чаще всего время) - такой, что различные состояния соответствуют разным его значениям. *Процессом назовем набор состояний системы, соответствующий упорядоченному непрерывному или дискретному изменению некоторого параметра, определяющего характеристики (свойства) системы*.

Часто выполнение одних задач исследования системы затрудняет решение других, но в целом основным и единственным критерием оценки функционирования подсистем должно быть обеспечение максимума эффективности системы. Следовательно, свойства системы, как сложного объекта, не обнаруживаются в свойствах её отдельных подсистем. Это значит, что традиционный метод изучения целого путём анализа его частей и последующего объединения (суперпозиции) их свойств непригоден для больших и сложных систем. А для физических нелинейных систем принцип прямой суперпозиции и вовсе неприемлем. Решением проблемы становится *системный подход*, суть которого состоит во взаимосвязанном рассмотрении всех элементов (подсистем) системы. При системном подходе система рассматривается не изолированно, а как подсистема более общей системы. Основным при системном подходе является определение цели, например, условие предельного равновесия деформируемой среды. Для каждой цели должен быть выбран свой надёжный критерий эффективности. Например, для деформируемых систем это может быть удовлетворение принципа стационарности полной энергии системы. Системный подход характеризуется системой принципов. Принципы системного подхода - это некоторые утверждения общего характера, обобщающие опыт человека по исследованию сложных систем. Основные принципы следующие:

1. Принцип конечной цели: абсолютный приоритет конечной цели.

2. Принцип единства: совместное рассмотрение системы как целого и как совокупности частей (элементов).

3. Принцип связности: рассмотрение любой части системы совместно с ее связями.

4. Принцип модульного построения: полезно выделение модулей в системе и рассмотрение ее как совокупности модулей.

5. Принцип иерархии: полезно введение иерархии частей и (или) их ранжирование.

6. Принцип функциональности: совместное рассмотрение структуры и функции с приоритетом функции над структурой.

7. Принцип развития: учет изменяемости системы, ее способности к развитию, расширению, замене частей, накоплению информации.

8. Принцип децентрализации: сочетание в принимаемых решениях и управлении централизации и децентрализации.

9. Принцип неопределенности: учет неопределенностей в системе.

Системный подход при исследовании различных систем, явлений, объектов позволяет с единых позиций строить общую методологию их исследования независимо от их природы. Эта методология, как и любая другая, содержит определенные этапы.

Этап 1. Определение системы.

1. Определение системы и области её существования.

2. Определение исследуемой функции системы.

3. Определение краевых условий.

4. Декомпозиция системы вплоть до простых элементов.

5. Определение свойств элементов системы и модулей.

6. Нахождение связей между элементами и модулями системы.

Этап 2. Построение математической модели.

1. Формальное описание исследуемой функции.

2. Разработка дискретной модели системы.

3. Разработка алгоритмической модели.

4. Разработка программного обеспечения (машинной модели).

5. Проверка адекватности математической модели системы.

Этап 3. Исследование системы при различных входных воздействиях и совершенствование модели системы.

При исследовании систем механики деформируемого твёрдого тела идеи системного подхода находят применение. Проблемы возникают в связи с количеством объектов исследуемых систем, разнородностью их свойств и изменением этих свойств в процессе функционирования системы. К причинам создающим указанную проблему относятся задачи исследования систем нелинейно-деформируемых твёрдых тел и неприменимость к ним принципа прямой суперпозиции.

2. РЕШЕНИЕ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

2.1. Основные определения алгебры матриц

Напомним основные определения алгебры матриц. Если $m \cdot n$ выражений расставлены в прямоугольной таблице из m строк и n столбцов, то говорят о матрице размера $m \times n$. Выражения a_{ij} называют элементами матрицы. Элементы $a_{ij} (i=1, \dots, m)$, стоящие в таблице на линии, проходящей из левого верхнего угла в правый нижний угол квадрата $n \times n$, образуют главную диагональ матрицы. Матрица размером $n \times n$ ($m \neq n$) называется прямоугольной. В случае если $m = n$, то матрицу называют квадратной матрицей порядка n . В частности, матрица типа $1 \times n$ — это вектор–строка, а матрица размером $m \times 1$ является вектором–столбцом. Число (скаляр) можно рассматривать как матрицу типа 1×1 . Квадратная матрица $A = \{a_{ij}\}$ размером $n \times n$ называется:

1. нулевой, если все ее элементы равны нулю: $A = \{a_{ij} = 0\}$ верхней треугольной, если все элементы, расположенные ниже главной диагонали, равны нулю: $A = \{a_{ij} = 0, \text{ для всех } i > j\}$;
2. нижней треугольной, если все элементы, расположенные выше главной диагонали, равны нулю: $A = \{a_{ij} = 0, \text{ для всех } i < j\}$;
3. диагональной, если все элементы, кроме элементов главной диагонали, равны нулю: $A = \{a_{ij} = 0, \text{ для всех } i \neq j\}$;
4. единичной, если элементы главной диагонали равны единице, а все остальные — нулю: $A = \{a_{ij} = 0, \text{ для всех } i \neq j \text{ и } a_{ij} = 1, \text{ для всех } i = j\}$;

С квадратной матрицей связано понятие определителя, или детерминанта. Определителем матрицы A является число $\det A$, или Δ , вычисляемое по правилу:

$$\det A = \sum_{(i_1, i_2, \dots, i_n)} (-1)^\lambda a_{1i_1} a_{2i_2} \dots a_{ni_n}$$

где сумма распределена на всевозможные перестановки (i_1, i_2, \dots, i_n) 1, 2, ..., n и, следовательно, содержит $n!$ слагаемых, причем $\lambda = 0$, если перестановка четная, и $\lambda = 1$, если перестановка нечетная. Квадратная матрица называется невырожденной, если ее определитель отличен от

нуля. В противном случае матрица называется вырожденной, или сингулярной.

С матрицами можно проводить операции сравнения, сложения и умножения. Две матрицы $A = \{a_{ij}\}$ и $B = \{b_{ij}\}$ – считаются равными, если они одного типа, то есть имеют одинаковое число строк и столбцов, и соответствующие элементы их равны $\{a_{ij}\} = \{b_{ij}\}$. Суммой двух матриц $A = \{a_{ij}\}$ и $B = \{b_{ij}\}$ одинакового типа называется матрица $C = \{c_{ij}\}$ того же типа, элементы которой равны сумме соответствующих элементов матриц $A = \{a_{ij}\}$ и $B = \{b_{ij}\}$ то есть $\{c_{ij}\} = \{a_{ij} + b_{ij}\}$. Разность матриц определяется аналогично. Произведением числа a на матрицу $A = \{a_{ij}\}$ (или произведением матрицы на число) называется матрица, элементы которой получены умножением всех элементов матрицы A на число a , то есть $A = a \cdot A = A\{a \cdot a_{ij}\}$. Произведением матриц $A = \{a_{ij}\}$ размерностью $m \times n$ и $B = \{b_{ij}\}$ размерностью $n \times s$ является матрица C размерностью $m \times s$, каждый элемент которой можно представить формулой

$$\{c_{ij}\} = \{a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \dots + a_{in}b_{nj}, i = 1, \dots, m, j = 1, \dots, s\}.$$

Таким образом, произведение матриц $A \cdot B$ имеет смысл тогда и только тогда, когда количество строк матрицы A совпадает с количеством столбцов матрицы B . Кроме того, произведение двух матриц не обладает переместительным законом, то есть $A \cdot B \neq B \cdot A$. В тех случаях, когда $A \cdot B = B \cdot A$, матрицы A и B называются перестановочными.

Если в матрице $A = \{a_{ij}\}$ размерностью $m \times n$ заменить строки соответствующими столбцами, то полученная транспонированная матрица $A^T = \{a_{ij}\}$. В частности, для вектора–строки транспонированной матрицей является вектор–столбец.

Обратной матрицей по отношению к данной матрице $A = \{a_{ij}\}$ размерностью $n \times n$ называется матрица $A^{-1} = \{A_{ij}\}$ того же типа, которая, будучи умноженной как справа, так и слева на данную матрицу, в результате дает единичную матрицу $E = \{\delta_{ij}\}$: $A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = E$. Нахождение обратной матрицы для данной называется обращением данной матрицы. Всякая неособенная матрица имеет обратную матрицу.

Коэффициент M для i -й строки выбирается из условия $a_{i1} - M \cdot a_{11} = 0$, и равен $M = a_{i1}/a_{11}$

$$A' = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} & b_1 \\ 0 & a_{22} & \dots & a_{2n} & b_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & a_{n2} & \dots & a_{nn} & b_n \end{pmatrix}$$

Заметим, что если в матрице (2.2) на главной диагонали встретится элемент a_{kk} , равный нулю, то расчет коэффициента $M = a_{ik}/a_{kk}$ для k -й строки будет невозможен. Избежать деления на ноль можно, избавившись от нулевых элементов на главной диагонали. Для этого перед обнулением элементов в k -м столбце необходимо найти в нем максимальный по модулю элемент, запомнить номер строки, в которой он находится, и поменять её местами с k -й.

[illegible]

В случае если $a_{nn} = 0$ и $b_n = 0$, то система (2.4), а, следовательно, и система (2.1) имеет бесконечное множество решений.

Формула для вычисления i -го значения x будет иметь вид:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j}{a_{ii}}. \quad (2.5)$$

2.2.2 Метод исключения Жордана – Гаусса или полного исключения

Сводится к преобразованию исходной системы к системе с единичной или диагональной матрицей.

Вычислительная схема метода состоит из n циклов, в каждом из которых последовательно с помощью k -ой строки исключаются элементы при x_k – ой неизвестной в каждой из $n - 1$ –ой строки, кроме k -ой. Схема реализуется по следующим формулам:

1. Деление k -ой строки на число a_{kk}

$$d_p^{(k)} = \frac{a_{kp}^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}}, \quad p = k, \dots, n, \quad k = 1, 2, \dots, n, \quad (2.6)$$

$$b_k^{(k)} = \frac{b_k^{(k)}}{a_{kk}^{(k)}};$$

2. Вычитание k -ой строки из m -ой строки

$$a_{np}^{(k+1)} = a_{np}^{(k)} - d_p^{(k)} \cdot a_{nk}^{(k)}, \quad p = k, \dots, n; \quad m > k, \quad (2.7)$$

$$b_m^{(k+1)} = b_m^{(k)} - a_{mk}^{(k)} \cdot b_k^{(k)}.$$

3. В результате n циклов получается система с единичной матрицей

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1^{(1)} \\ b_2^{(2)} \\ \dots \\ b_n^{(n)} \end{bmatrix} \quad (2.8)$$

или

$$x_i = b_i^{(n)}, \quad i = 1, 2, \dots, n.$$

Шагами 1 – 3 определяется поэлементная форма записи основной вычислительной схемы метода исключения Жордана – Гаусса.

Необходимым и достаточным условием применимости метода является неравенство нулю всех ведущих элементов, $a_{kk}^{(k)} \neq 0$.

2.2.3 Методы разложения матрицы коэффициентов системы линейных уравнений на подматрицы

Метод LL^T разложения. Пусть дана система линейных алгебраических уравнений (2.1). Запишем ее в матричной форме:

$$A \cdot x = b \quad (2.8)$$

где $A = \{a_{ij}\}$ - симметрическая матрица, то есть $A^T = \{a_{ji}\} = A$. Тогда матрицу A можно представить в виде произведения двух транспонированных между собой треугольных матриц

$$A = L \cdot L^T, \quad (2.9)$$

где

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{12} & l_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{1n} & l_{2n} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad L^T = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & \dots & l_{1n} \\ 0 & l_{22} & \dots & l_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & l_{nn} \end{pmatrix}.$$

Перемножение матриц L и L^T дает следующие уравнения:

$$\begin{cases} l_{1i} \cdot l_{1j} + l_{2i} \cdot l_{2j} + \dots + l_{ii} \cdot l_{ij} = a_{ij}, & (i < j), \\ l_{1i}^2 + l_{2i}^2 + \dots + l_{ii}^2 = a_{ii}. \end{cases} \quad (2.10)$$

Отсюда последовательно находим:

$$\begin{cases} l_{11} = \sqrt{a_{11}}, \quad l_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}}, & (i > 1), \\ l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ki}^2}, & (1 < i \leq n), \\ l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ki} \cdot l_{kj}}{l_{ii}}, & (i < j), \\ l_{ij} = 0, & (i > j) \end{cases}$$

Система (2.8) имеет определенное единственное решение, если $l_{ii} \neq 0$, $(i = 1, 2, \dots, n)$, так как тогда

$$\det A = \det L \cdot \det L^T = (\det L)^2 = (l_{11} l_{22} \dots l_{nn})^2 \neq 0.$$

В случае если соотношение (2.10) выполняется, уравнение (2.9) эквивалентно двум уравнениям:

$$L \cdot y = b \quad \text{и} \quad L^T \cdot x = y,$$

На практике метод LL^T разложения применяют так. Прямым ходом последовательно вычисляются коэффициенты l_{ij} и y_i ($i = 1, 2, \dots, n$), а затем обратным ходом находятся неизвестные x_i ($i = n, n-1, \dots, 1$).

В общем случае метод квадратных корней применим и для вычисления комплексных корней системы (2.1), так как если для неко-

торой m -й строки выполняется условие $(l_{mm})^2 < 0$, то соответствующие элементы l_{mj} – мнимые.

Метод LU разложения с единицами на главной диагонали матрицы U. Идея метода заключается в следующем [1].

Представим систему (2.1) в матричном виде

$$A \cdot x = b \quad (2.11)$$

где $A = \{a_{ij}\}$ – квадратная матрица порядка n .

Представим матрицу A в виде $A = L \cdot U$, где $L = \{l_{ij}\}$ – нижняя треугольная матрица, а $U = \{u_{ij}\}$ – верхняя треугольная матрица с единичной диагональю:

$$L = \begin{pmatrix} l_{11} & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & l_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{nn} \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} 1 & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & 1 & \dots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$$

Тогда элементы l_{ij} и u_{ij} определяются по формулам:

$$\begin{cases} l_{i1} = a_{i1}, \\ l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, (i \geq j > 1) \end{cases} \quad (2.12)$$

и

$$\begin{cases} u_{1j} = \frac{a_{1j}}{l_{11}}, \\ u_{ij} = \frac{1}{u_{ii}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} u_{kj} \right), (1 < i < j). \end{cases} \quad (2.13)$$

Следовательно, вектор x можно вычислить из системы

$$L \cdot y = b, U \cdot x = y, \quad (2.14)$$

причем она легко решается, так как матрицы L и U – треугольные.

Метод LU разложения с единицами на главной диагонали матрицы L. Представим матрицу $A = \{a_{i,j}\}$ в виде произведения треугольных матриц $L = \{l_{ij}\}$ и $U = \{u_{ij}\}$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ l_{21} & 1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & 1 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} u_{11} & u_{12} & \dots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \dots & u_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & u_{nn} \end{pmatrix}$$

где элементы l_{ij} и u_{ij} определяются по формулам:

$$\begin{cases} u_{1j} = a_{1j}, (j = 1, 2, \dots, n) \\ u_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, (i \leq j) \end{cases} \quad (2.15)$$

и

$$\begin{cases} l_{1j} = \frac{a_{j1}}{u_{11}}, (j = 2, \dots, n) \\ l_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} u_{kj}, (i \leq j) \end{cases} \quad (2.16)$$

Формулы(2.15) и (2.16) дают нам LU -разложение матрицы A .
Итак ,если $A = L \cdot U$, то можно записать уравнение:

$$L \cdot U \cdot X = b \quad (2.17)$$

Введем вектор вспомогательных переменных $\gamma = (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n)^T$
и представим уравнение (2.17) в виде системы:

$$\begin{cases} L \cdot y = b, \\ U \cdot x = y. \end{cases}$$

Таким образом, решение системы (2.1) с квадратной матрицей коэффициентов сводится к решению двух систем с треугольными матрицами коэффициентов:

$$\begin{cases} y_1 = b_1, \\ l_{21} \cdot y_1 + y_2 = b_2 \\ \dots \dots \dots \\ l_{n1} \cdot y_1 + l_{n2} \cdot y_2 + \dots + l_{n,n-1} \cdot y_n = b_n \end{cases} \quad (2.18)$$

и

$$\begin{cases} u_{11} \cdot x_1 + u_{12} \cdot x_2 + \dots + u_{1n} \cdot x_n = y_1 \\ u_{22} \cdot x_2 + \dots + u_{2n} \cdot x_n = y_2 \\ \dots \dots \dots \\ u_{nn} \cdot x_n = y_n \end{cases} \quad (2.19)$$

Из (2.17) и (2.19) понятно, что все y_i могут быть вычислены по формуле:

$$y_i = b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k, (i = 1, 2, \dots, n), \quad (2.20)$$

а для всех x_i истинно равенство

$$x_i = \frac{1}{u_{ij}} (y_i - \sum_{k=i+1}^n u_{ik} x_k), (i = n, n-1, \dots, 2, 1) \quad (2.21)$$

2.2.4 Метод ортогонализации

Заключается он в том, что систему (2.1) ортонормируют, то есть приводят ее к виду:

$$Q \cdot x = d, \quad (2.22)$$

где Q – ортогональная матрица. Для этого разделим первое уравнение системы (2.1) на выражение

$$\sqrt{\sum_{k=1}^n a_{1k}^2}.$$

Получим

$$q_{1j} = \frac{a_{1j}}{\sqrt{\sum_{k=1}^n a_{1k}^2}}, \quad d_1 = \frac{b_1}{\sqrt{\sum_{k=1}^n a_{1k}^2}}, \quad (j = 1, 2, \dots, n). \quad (2.23)$$

Тогда для второго уравнения системы (2.22) имеем:

$$\left. \begin{aligned} q_{2j} &= \frac{a'_{2j}}{\sqrt{\sum_{k=1}^n a_{2k}'^2}}, \quad d_2 = \frac{b_2'}{\sqrt{\sum_{k=1}^n a_{2k}'^2}}, \quad j = (1, 2, \dots, n), \\ q'_{2j} &= a_{2j} - q_{1j} \cdot \sum_{k=1}^n a_{2k} \cdot q_{1k}, \quad d_2' = b_2 - d_1 \cdot \sum_{k=1}^n a_{2k} \cdot q_{1k}. \end{aligned} \right\}$$

Следовательно, уравнение с номером i примет вид:

$$\left. \begin{aligned} q_{ij} &= \frac{q'_{ij}}{\sqrt{\sum_{k=1}^n q'^2_{ik}}}, d_i = \frac{d'_i}{\sqrt{\sum_{k=1}^n q'^2_{ik}}} (i = 2, 3, \dots, n; j = 1, 2, \dots, n), \\ q'_{ij} &= a_{ij} - q_{1j} \cdot \sum_{k=1}^n a_{ik} \cdot q_{1k} - q_{2j} \cdot \sum_{k=1}^n a_{ik} \cdot q_{2k} - \dots - q_{i-1j} \cdot \sum_{k=1}^n a_{ik} \cdot q_{i-1k}, \\ d'_2 &= b_2 - d_1 \cdot \sum_{k=1}^n a_{ik} \cdot q_{ik} - d_2 \cdot \sum_{k=1}^n a_{ik} \cdot q_{2k} - \dots - d_{i-1} \cdot \sum_{k=1}^n a_{ik} \cdot q_{i-1k}. \end{aligned} \right\} (2.24)$$

Если система (2.1) совместна, то, воспользовавшись формулами (2.23) и (2.24), можно перейти к новой системы (2.22) где матрица Q будет ортогональной, а это значит, что она будет обладать свойством:

$$Q^T \cdot Q = E,$$

где E единичная матрица. Значит, решение системы (2.22) можно записать в виде:

$$Q^T \cdot Q \cdot x = Q^T \cdot d,$$

или

$$x = Q^T \cdot d.$$

Заметим, что этим алгоритмом можно воспользоваться, если необходимо решить задачу вычисления ортогональной матрицы Q для матрицы A . Понятно, что в этом случае расчет вектора d теряет смысл.

2.2.5 Метод прогонки

На практике часто встречаются линейные системы вида:

$$\begin{pmatrix} c_1 & d_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & c_2 & d_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & c_3 & d_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & b_{n-1} & c_{n-1} & d_{n-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & b_n & c_n \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \dots \\ x_{n-1} \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \\ \dots \\ r_{n-1} \\ r_n \end{pmatrix},$$

которые называют системами с трехдиагональной матрицей коэффициентов. Каждое уравнение такой системы связывает три неизвестных, расположенных особым образом, и может быть записано в общем виде так:

$$b_i \cdot x_{i-1} + c_i \cdot x_i + d_i \cdot x_{i+1} = r_i \quad (2.26)$$

где $i=1, 2, n$, $b_1 = 0$, $d_n = 0$. Такие уравнения называют трехточечными разностными уравнениями второго порядка. Для решения систем (2.26) существует специальный метод, называемый методом прогонки. Заключается он в следующем [2]. Предположим, что существуют такие наборы чисел $\delta_i, \lambda_i (i = 1, 2, \dots, n)$, для которых

$$x_i = \delta_i \cdot x_{i+1} + \lambda_i \quad (2.27)$$

Уменьшим индекс в уравнении (2.27) и подставим его в (2.26), получим

$$b_i \cdot \delta_{i-1} \cdot x_i + b_i \cdot \lambda_{i-1} + c_i \cdot x_i + d_i \cdot x_{i+1} = r_i,$$

откуда имеем

$$x_i = -\frac{d_i}{c_i + b_i \cdot \delta_{i-1}} \cdot x_{i+1} + \frac{r_i - b_i \cdot \lambda_{i-1}}{c_i + b_i \cdot \delta_{i-1}}$$

Следовательно, уравнение (2.27) имеет место, если для всех $i = 1, 2, \dots, n$, выполняются рекуррентные соотношения:

$$\delta_i = -\frac{d_i}{c_i + b_i \cdot \delta_{i-1}}, \quad \lambda_i = \frac{r_i - b_i \cdot \lambda_{i-1}}{c_i + b_i \cdot \delta_{i-1}} \quad (2.28)$$

Нетрудно заметить что, так как $b_1 = 0$, то процесс вычисления δ_i, λ_i по формулам (2.28) можно начать со значений

$$\delta_1 = -\frac{d_1}{c_1}, \lambda_1 = \frac{r_1}{c_1}$$

и продолжать для $i = 1, 2, \dots, n$. В случае, когда $i = n$ и $d_n = 0$, получим $\delta_n = 0$, то есть для $i = n$ будем иметь

$$x_n = \lambda_n = \frac{r_n - b_n \cdot \lambda_{n-1}}{c_n + b_n \cdot \delta_{n-1}}$$

где λ_{i-1} и δ_{i-1} были вычислены на предыдущем шаге. Далее по формулам (2.28) последовательно находятся значения $x_{n-1}, x_{n-2}, \dots, x_1$ при $i=n-1, n-2, \dots, 1$.

1. Находят прогоночные коэффициенты δ_i, λ_i по формулам (2.28). Этот процесс называют прямой прогонкой

2. Определяются неизвестные по формуле (2.27), выполняя тем самым обратную прогонку.

$$x_i^k = \beta_i + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \cdot x_j^k, (i=1,2,\dots,n; k=1,2,\dots). \quad (2.34)$$

Вообще говоря, если последовательность приближений $x^0, x^1, x^2, \dots, x^k, \dots$ имеет предел $x = \lim_{k \rightarrow \infty} x^k$, то этот предел и является решением системы (2.32).

При практическом применении метода итерации вычисления прекращают, когда выполняется условие

$$\max (|x - x^k|) \leq \varepsilon \quad (2.35)$$

где ε – заданная точность вычислений.

Приведем без доказательства условие сходимости метода итерации [1]: для существования единственного решения системы (2.29) и сходимости метода простых итераций достаточно выполнения условия

$$\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n |a_{ij}| < |a_{ii}|, \quad i=1,2,\dots,n, \quad (2.36)$$

то есть чтобы модули диагональных коэффициентов для каждого уравнения системы были больше суммы модулей всех остальных коэффициентов, не считая свободных.

Итак, алгоритм метода простой итерации заключается в следующем:

1. Проверка условий (2.36), если они не выполняются, то работа алгоритма завершена, иначе переходим к п.2.
2. Формирование матрицы α и массива β по формулам (2.31).
3. Формирование начального приближения x^0 по (2.33).
4. Расчет нового приближения x^1 по (2.34).
5. Если условие (2.35) выполняется и максимальная ошибка вычислений меньше заданного числа ε , то решение x^1 найдено, иначе переходим к п.4.

2.3.2 Метод Зейделя

Представляет собой модификацию метода простой итерации. Основная идея [1] этого метода заключается в том, что при вычислении $(k+1)$ -го приближения неизвестной x_i учитываются уже вычисленные к этому времени $(k+1)$ -е предшествующих неизвестных x_1, x_2, \dots, x_{i-1} .

Пусть дана приведенная линейная система

$$x_i = \beta_i + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \cdot x_j (i = 1, 2, \dots, n). \quad (2.37)$$

Выберем в качестве начального приближения корней вектор

$$x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0 \quad (2.38)$$

Тогда, согласно идее метода Зейделя, предполагая, что k -е приближения корней известны, будем строить $(k+1)$ -е приближения по следующим формулам:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_1^{k+1} = \beta_1 + \sum_{j=1}^n \alpha_{1j} \cdot x_j^k; \\ x_2^{k+1} = \beta_2 + \alpha_{21} \cdot x_1^{k+1} + \sum_{j=2}^n \alpha_{2j} \cdot x_j^k; \\ \dots\dots\dots \\ x_i^{k+1} = \beta_i + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \cdot x_j^{k+1} + \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \cdot x_j^k; \\ \dots\dots\dots \\ x_n^{k+1} = \beta_n + \sum_{j=1}^{n-1} \alpha_{nj} \cdot x_j^{k+1} + \sum_{j=i}^n \alpha_{nn} \cdot x_n^k, (k = 0, 1, 2, \dots). \end{array} \right. \quad (2.39)$$

Возникает вопрос о сходимости метода. Заметим, что условия (2.36) применимы и для метода Зейделя, кроме того, если линейная система (2.29) — нормальная, то процесс Зейделя для эквивалентной ей приведенной системы сходится всегда. Напомним, что линейная система (2.29) называется нормальной, если матрица коэффициентов $A = \{a_{ij}\}$ — симметрическая, то есть $a_{ij} = a_{ji}$ и соответствующая квадратичная форма

$$u = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \alpha_{ij} \cdot x_i \cdot x_j$$

положительно определена.

Возникает проблема, как от системы (2.39) перейти к системе (2.32) таким образом, чтобы выполнялись все условия сходимости. Выполним следующие преобразования:

$$A^T \cdot A \cdot x = A^T \cdot b$$

Пусть

$$F = A^T \cdot A \text{ и } H = A^T \cdot b \quad (2.40)$$

Тогда система

$$F \cdot x = H \quad (2.41)$$

эквивалентна системе $A \cdot x = b$ и обладает следующими свойствами:

- Матрица F симметрична, то есть $f_{ij} = f_{ji}$
- Все элементы главной диагонали матрицы F положительны:
 $f_{ij} > 0$;
- Соответствующая квадратичная форма является положительной определенной.

Теперь, если систему привести к специальному виду:

$$x_i = \sum_{j \neq i} \alpha_{ij} \cdot x_j + \beta_i \quad (2.42)$$

где

$$\begin{aligned} \beta_i &= \frac{h_i}{f_{ij}} \\ \alpha_{ij} &= -\frac{f_{ij}}{f_{ij}}, (i \neq j) \\ \alpha_{ij} &= 0, (i = j) \end{aligned} \quad (2.43)$$

то она будет сходиться к единственному решению при любом начальном приближении.

3 АППРОКСИМАЦИЯ ФУНКЦИЙ

3.1 Интерполирование функций

Простейшая задача интерполирования заключается в следующем. На отрезке $[a, b]$ заданы $n+1$ точки $x_0, x_1, x_2, \dots, x_n$, которые называют узлами интерполяции, и значения некоторой функции $f(x)$ в этих точках (рис. 3.1).

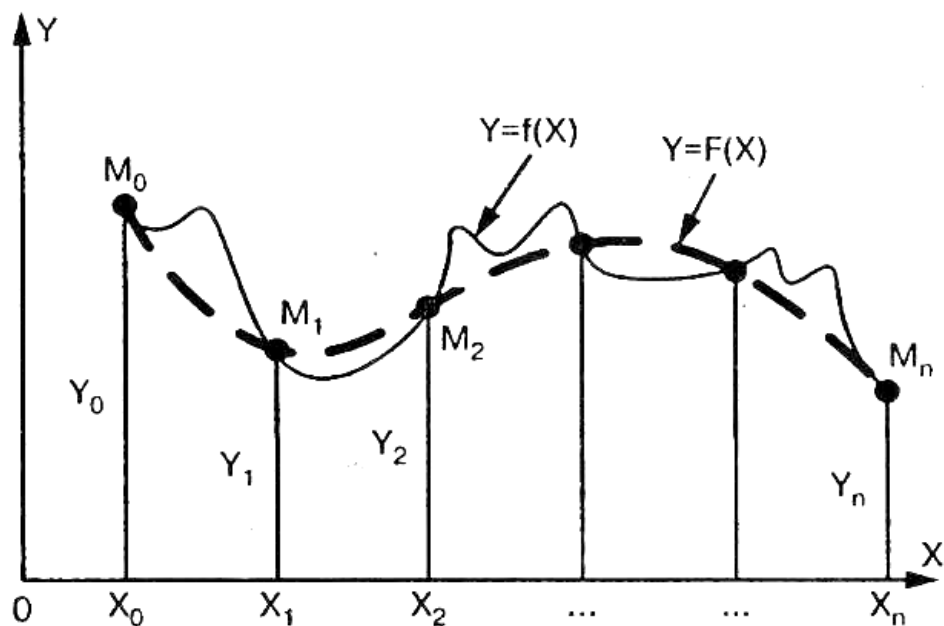


Рис. 3.1 Геометрическая интерпретация интерполирования

В такой общей постановке задача может иметь бесчисленное множество решений или не иметь их совсем. Однако эта задача становится однозначной, если вместо произвольной функции $F(x)$ искать полином $P_n(x)$ степени n , такой, что

$$P_n(x_0) = y_0, P_n(x_1) = y_1, P_n(x_2) = y_2, \dots, P_n(x_n) = y_n \quad (3.1)$$

где известны значения исходной функции

$$f(x_0) = y_0, f(x_1) = y_1, \dots, f(x_n) = y_n \quad (3.2)$$

Полученную интерполяционную формулу $y = F(x)$ обычно используют для приближенного вычисления значений данной функции $f(x)$ в точках x , отличных от узлов интерполирования. Такая операция называется *интерполированием функции $f(x)$* . При этом различают *интерполирование в узком смысле*, когда $x \in [x_0, x_n]$ и *экстраполирование*, когда $x \notin [x_0, x_n]$

Рассмотрим некоторые наиболее часто используемые интерполяционные полиномы.

3.1.1 Канонический полином

Будем искать интерполирующую функцию $F(x)$ в виде канонического полинома степени n :

$$F(x) = P_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + \dots + a_nx^n \quad (3.3)$$

Выбор многочлена степени n основан на том факте, что через $n+1$ точку проходит единственная кривая степени n . Подставив (3.1) в (3.3), получим систему линейных алгебраических уравнений:

[illegible]

Решая эту систему относительно переменных a_0, a_1, \dots, a_n , найдём коэффициенты интерполяционного полинома (3.3).

Блок-схема нахождения значения функции в точке $t \in [x_0, x_n]$ с помощью интерполяционного канонического полинома приведена на рис. 3.2. Решение системы (3.4) может осуществляться одним из рассмотренных в первой главе методов решения систем линейных алгебраических уравнений (например, методом Гаусса).

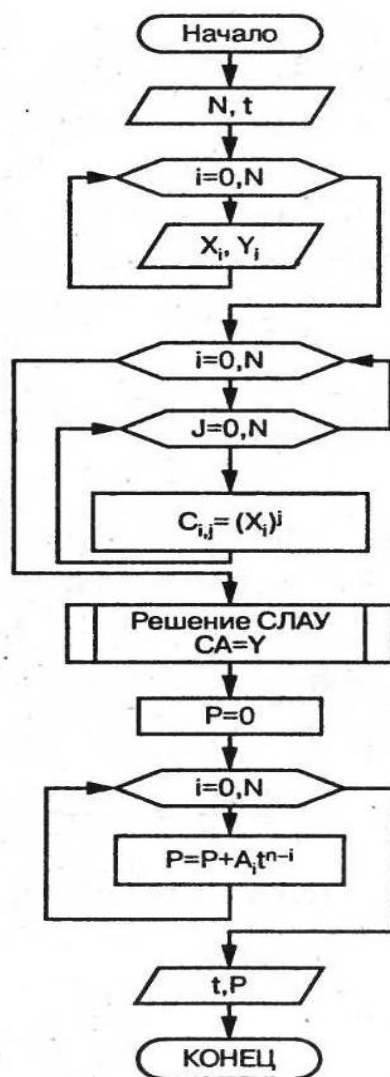


Рис. 3.2 Блок–схема интерполирования с помощью канонического полинома

3.1.2 Полином Ньютона

Исаак Ньютон предложил записать интерполирующую функцию в виде следующего полинома n -й степени:

$$F(t) = A_0 + A_1(t - x_0) + A_2(t - x_0)(t - x_1) + \dots + A_n(t - x_0)(t - x_1)\dots(t - x_{n-1}) \quad (3.5)$$

Подставим $F(x_0) = y_0$ в (3.5), вычислив тем самым значение коэффициента A

$$A_0 = y_0$$

Подставим $F(x_1) = y_1$ в (3.5), для вычисления A_1 воспользуемся следующим соотношением:

$$F(x_1) = A_0 + A_1(x_1 - x_0) = y_1.$$

Отсюда коэффициент A_1 рассчитывается по формуле:

$$A_1 = \frac{y_0 - y_1}{x_0 - x_1} = y_{01},$$

где y_{01} - *разделенная разность первого порядка*, которая стремится к первой производной функции при $x_1 \rightarrow x_0$. Аналогичным образом вводятся остальные разделенные разности первого порядка:

$$y_{02} = \frac{y_0 - y_2}{x_0 - x_2}, y_{03} = \frac{y_0 - y_3}{x_0 - x_3}, \dots, y_{0n} = \frac{y_0 - y_n}{x_0 - x_n}.$$

Подставим $F(x_2) = y_2$ в (3.5):

$$A_0 + A_1(x_2 - x_0) + A_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2;$$

$$y_0 + y_{01}(x_2 - x_0) + A_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2;$$

$$A_2(x_2 - x_0)(x_2 - x_1) = y_2 - y_0 - y_{01}(x_2 - x_0);$$

$$A_2 = \frac{y_2 - y_0}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} - \frac{y_{01}(x_2 - x_0)}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)},$$

$$A_2 = \frac{y_{02}}{x_2 - x_1} - \frac{y_{01}}{x_2 - x_1} = \frac{y_{01} - y_{02}}{x_1 - x_2} = y_{012},$$

Где y_{012} - *разделенная разность второго порядка*, эта величина стремится ко второй производной.

Аналогично вводятся $y_{013}, y_{014}, \dots, y_{01n}$:

$$y_{013} = \frac{y_{01} - y_{03}}{x_1 - x_3}, y_{014} = \frac{y_{01} - y_{04}}{x_1 - x_4}, \dots, y_{01n} = \frac{y_{01} - y_{0n}}{x_1 - x_n}.$$

Подставим $F(x_3) = y_3$ в (3.5):

$$A_3 = y_{0123} = \frac{y_{012} - y_{013}}{x_2 - x_3}.$$

Аналогично можно ввести коэффициенты:

$$y_{0124} = \frac{y_{012} - y_{014}}{x_2 - x_4}.$$

Этот процесс будем продолжать до тех пор, пока не вычислим

$$A_n = y_{012\dots n} = \frac{y_{012\dots n-1} - y_{012\dots n-2n}}{x_{n-1} - x_n}.$$

В вычислении по формуле (3.5) будут участвовать только диагональные элементы таблицы (то есть коэффициенты A_i), а все остальные элементы таблицы являются промежуточными и нужны для вычисления диагональных элементов. Исходя из вышеизложенного, составим блок-схему алгоритма (рис. 3.3) решения следующей задачи: вычислить зна-

чение функции, заданной в виде таблицы, в некоторой точке $t \in [x_0, x_n]$, используя интерполяционный полином Ньютона.

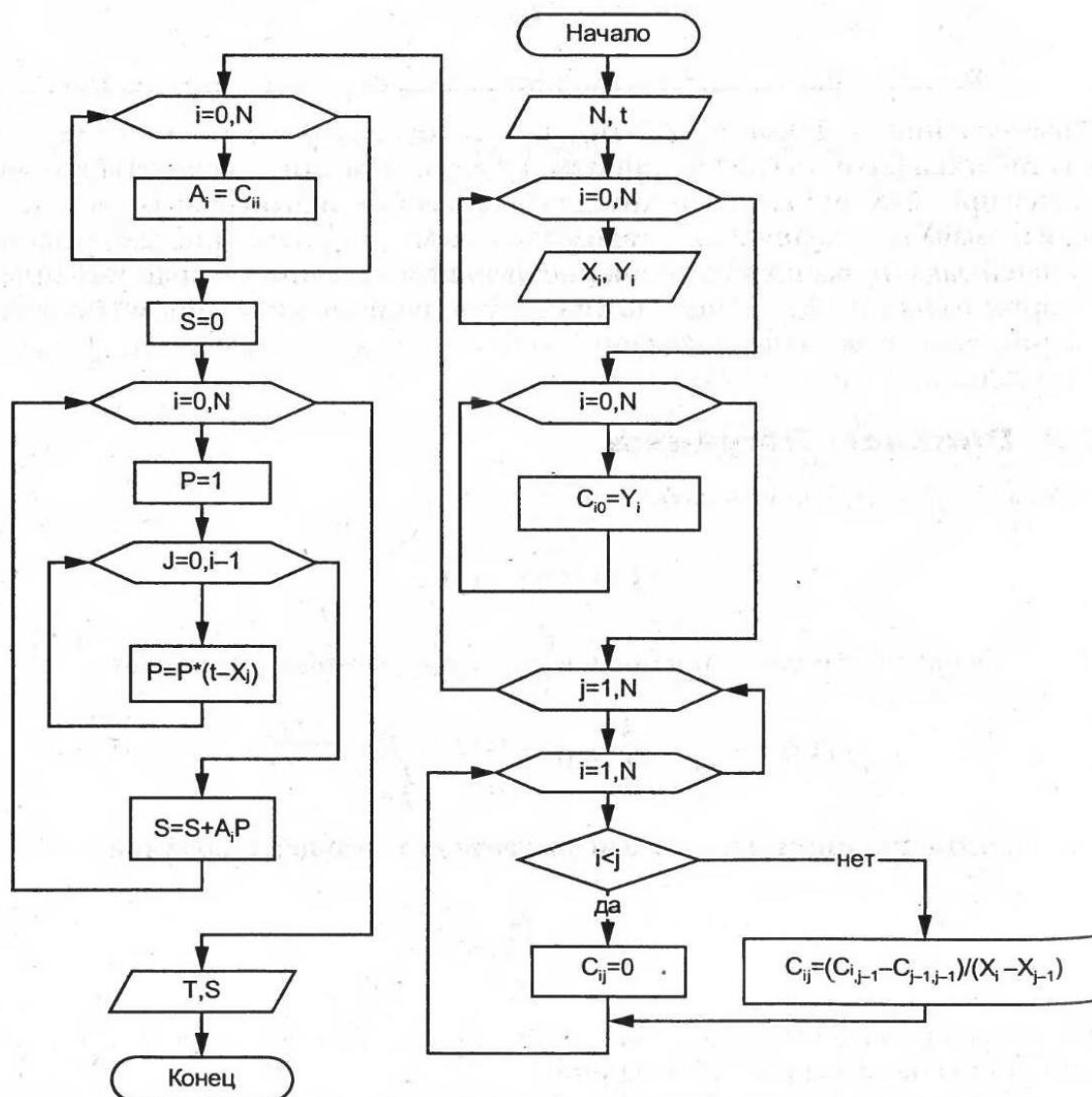


Рис. 3.3 Алгоритм интерполирования с помощью полинома Ньютона

Полученные результаты запишем в табл. 3.1.

Таблица 3.1 Таблица разделенных разностей полинома Ньютона

x	$f(x)$	1	2	3	4	...	n
x_0	y_0						
x_1	y_1	y_{01}					
x_2	y_2	y_{02}	y_{012}				
x_3	y_3	y_{03}	y_{013}	y_{0123}			
x_4	y_4	y_{04}	y_{014}	y_{0124}	y_{01234}		
...
x_n	y_n	y_{0n}	y_{01n}	y_{012n}	y_{0123n}	...	y_{0123n}

3.1.3 Полином Лагранжа

Полином Лагранжа будем искать в виде:

$$F(t) = \sum_{i=1}^n y_i L_i(t),$$

Где L_i - функция, удовлетворяющая в узлах x_k следующему свойству:

$$L_i(x_k) = \begin{cases} 1, i = k \\ 0, i \neq k \end{cases} \text{ или } L_i(t) = \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{t - x_j}{x_i - x_j}.$$

Таким образом, полином Лагранжа выражается следующей формулой:

$$F(t) = \sum_{i=1}^n y_i \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{t - x_j}{x_i - x_j}. \quad (3.6)$$

Алгоритм вычисления значения функции в заданной точке (рис. 3.4) достаточно прост и не нуждается в пояснении.

Все три рассмотренных полинома - это три различных способа построения одной и той же кривой

$$F(x) = F_n(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + \dots + a_{n-1}x^{n-1} + a_nx^n$$

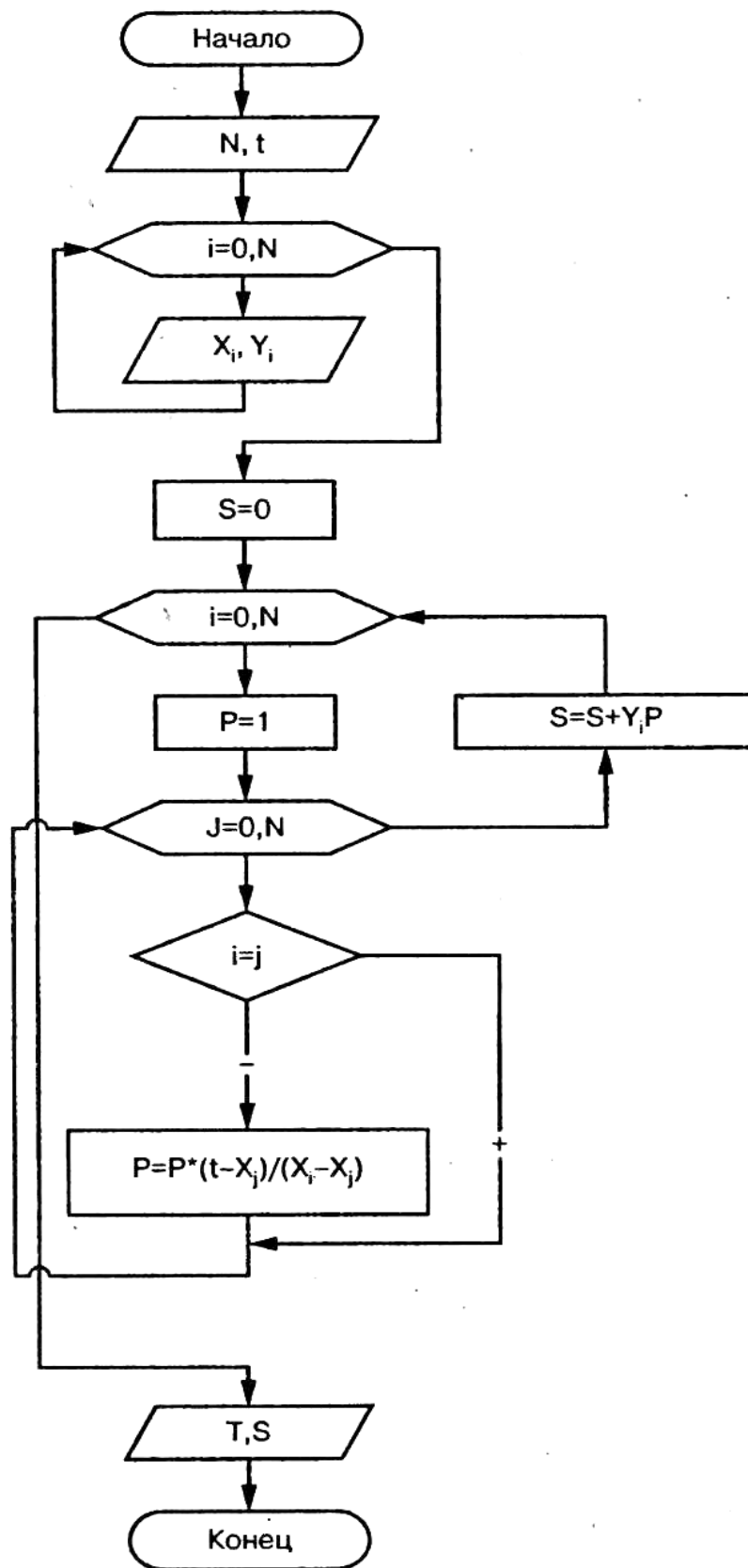


Рис. 3.4 Алгоритм интерполирования с помощью полинома Лагранжа

Полином Лагранжа лучше использовать, если необходимо вычислить значение в небольшом количестве точек. Для расчета во многих точках рационально использовать полином Ньютона, в котором, вычислив значения коэффициентов A_i , можно затем рассчитать ожидаемое значение в точках по формуле (3.5). При использовании канонического полинома приходится решать систему линейных алгебраических уравнений (3.4), поэтому он используется значительно реже.

3.2 Метод наименьших квадратов

3.2.1 Подбор параметров экспериментальной зависимости методом наименьших квадратов

Пусть в результате эксперимента были получены некоторые данные, представленные в виде таблицы (табл. 3.2).

Таблица 3.2 Экспериментальные данные

$x_2; x_3; x_4; x_5 \dots x_n$
$y_2; y_3; y_4; y_5 \dots y_n$

Если при решении задачи интерполяции подбираемая кривая проходит через экспериментальные точки, то в методе наименьших квадратов необходимо построить аналитическую зависимость $f(x, a_0, a_1, a_k)$, наиболее близко проходящую к экспериментальным точкам.

Подобранную методом наименьших квадратов зависимость принято называть аппроксимирующей. Синонимом термина метод наименьших квадратов является аппроксимация данных.

Задача подбора экспериментальной зависимости методом наименьших квадратов состоит из двух этапов: на первом этапе по экспериментальным данным выбирается вид зависимости (прямая, парабола, экспонента и т.д.), на втором - подбираются параметры выбранной зависимости.

Идея метода наименьших квадратов заключается в том, что функцию $y = f(x, a_0, a_1, a_k)$ необходимо подобрать таким образом, чтобы сумма квадратов отклонений экспериментальных значений y от расчетных была наименьшей (рис. 3.5):

Задача сводится к определению коэффициентов a_i из условия (3.7). Необходимо найти значения $a_0, a_1, a_2, \dots, a_k$, при которых функция $s(a_0, a_1, a_2, \dots, a_k)$ достигает минимального значения. Из условия экстремума функции многих переменных следует, что задача поиска минимума функции $s(a_0, a_1, a_2, \dots, a_k)$ эквивалентна решению системы уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial s}{\partial a_0} &= 0 \\ \frac{\partial s}{\partial a_1} &= 0 \\ &\dots\dots\dots \\ \frac{\partial s}{\partial a_k} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

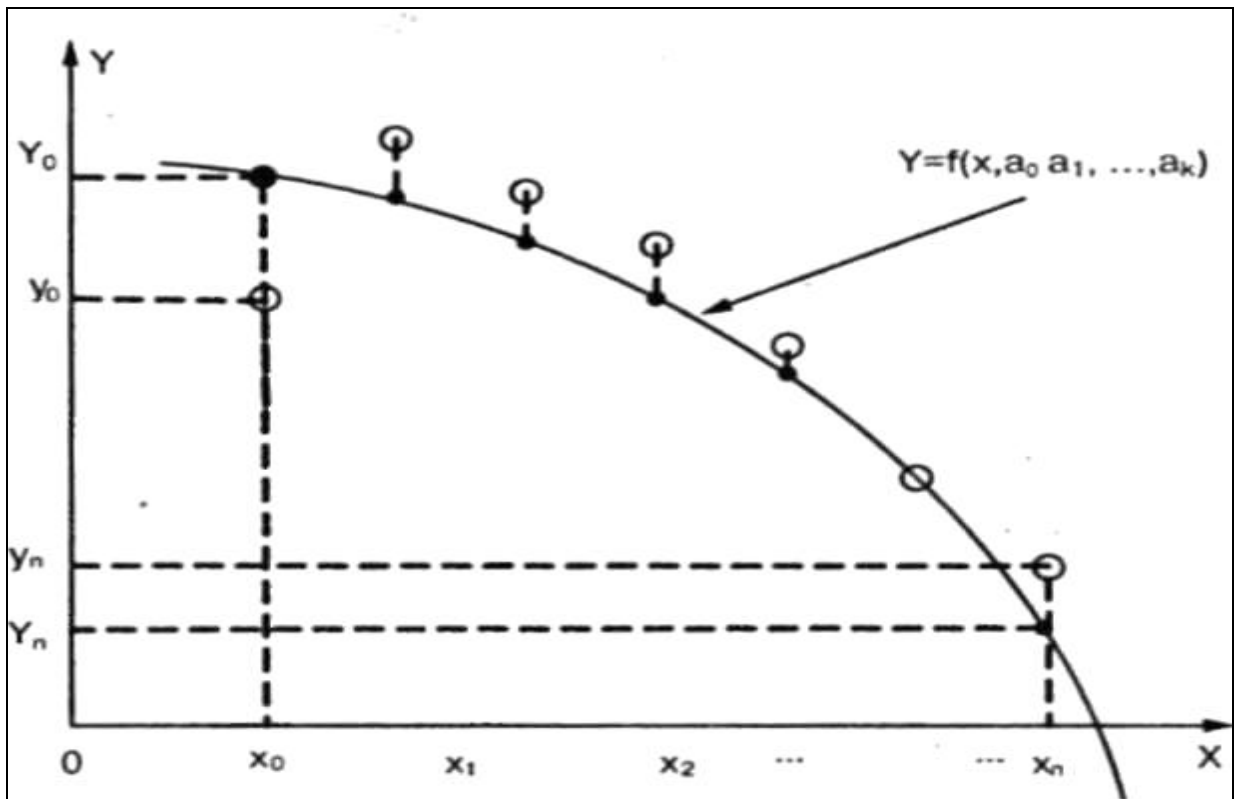


Рис. 3.5 Геометрическая интерпретация метода наименьших квадратов

Если параметры a_i входят в зависимость $y = f(a_0; a_1, \dots, a_k)$ линейно, то система уравнений является системой из $k + 1$ линейного уравнения с $k + 1$ неизвестными:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n -2(y_i - f(x_i, a_0, a_1 \dots a_k)) \frac{\partial f}{\partial a_0} = 0 \\ \sum_{i=1}^n -2(y_i - f(x_i, a_0, a_1 \dots a_k)) \frac{\partial f}{\partial a_1} = 0 \\ \dots\dots\dots \\ \sum_{i=1}^n -2(y_i - f(x_i, a_0, a_1 \dots a_k)) \frac{\partial f}{\partial a_k} = 0 \end{array} \right. \quad (3.8)$$

Решив систему уравнений (3.8), найдем коэффициенты a_i подбираемой зависимости $y = f(a_0; a_1 \dots a_k)$. В методе наименьших квадратов стараются преобразовать исходную функцию $y = f(a_0; a_1 \dots a_k)$ таким образом, чтобы получаемая система (3.8) была системой линейных алгебраических уравнений.

Рассмотрим подробнее, как подбирать параметры наиболее часто используемых функций.

3.2.2. Подбор коэффициентов линейной зависимости

Для подбора параметров линейной функции

$$Y = a_0 + a_1 x$$

составим функцию (3.1) для линейной зависимости:

$$s(a_0, a_1) = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i)^2$$

Продифференцировав функцию s по a_0 и a_1 , получим систему уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n (y_i - a - a_1 \cdot x_i) \cdot (-1) = 0 \\ \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 \cdot x_i) \cdot (-x_i) = 0 \end{array} \right\} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} a_0 \cdot n + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \cdot x_i \end{array} \right\}$$

решив которую определим коэффициенты функции $y = a_0 + a_1 x$:

$$\left\{ \begin{array}{l} a_0 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} - a_1 \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \\ a_1 = \frac{\sum_{i=1}^n y_i x_i - \sum_{i=1}^n y_i \sum_{i=1}^n x_i}{n \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 - (\sum_{i=1}^n x_i)^2} \end{array} \right. \quad (3.9)$$

3.2.3 Подбор коэффициентов полинома k-й степени

Для определения параметров зависимости $y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2$ составим функцию для нее (3.7):

$$s(a_0, a_1, a_2) = \sum_{i=1}^n (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2)^2$$

После дифференцирования s по a_0 , a_1 и a_2 получим систему уравнений:

$$\left. \begin{array}{l} n \cdot a_0 + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 = \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 = \sum_{i=1}^n y_i x_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4 = \sum_{i=1}^n y_i x_i^2 \end{array} \right\} \quad (3.10)$$

Решив систему (3.10) одним из методов, описанных в первой главе, найдем значение параметров a_0 , a_1 , a_2 .

Аналогично определим параметры многочлена третьей степени:

$$y = a_0 + a_1 \cdot x + a_2 \cdot x^2 + a_3 \cdot x^3$$

Составим функцию $s(a_0, a_1, a_2, a_3)$

$$s(a_0, a_1, a_2, a_3) = \sum_{i=1}^m (y_i - a_0 - a_1 x_i - a_2 x_i^2 - a_3 x_i^3)^2$$

$$\left. \begin{aligned} n \cdot a_0 + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_3 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 &= \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_3 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4 &= \sum_{i=1}^n y_i x_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4 + a_3 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^5 &= \sum_{i=1}^n y_i x_i^2 \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^4 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^5 + a_3 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^6 &= \sum_{i=1}^n y_i x_i^3 \end{aligned} \right\} \quad (3.11)$$

Решив систему (3.11), найдем коэффициенты a_0, a_1, a_2 и a_3 . В общем случае система уравнений для вычисления параметров a . многочлена k -й степени $y = a_0 + a_1x + a_1x^2 + \dots + a_kx^k$ имеет вид:

$$\left. \begin{aligned} n \cdot a_0 + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + \dots + a_k \cdot \sum_{i=1}^n x_i^k &= \sum_{i=1}^n y_i \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^2 + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^3 + \dots + a_k \cdot \sum_{i=1}^n x_i^{k+1} &= \sum_{i=1}^n y_i x_i \\ \dots\dots\dots \\ a_0 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^k + a_1 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^{k+1} + a_2 \cdot \sum_{i=1}^n x_i^{k+2} + \dots + a_k \cdot \sum_{i=1}^n x_i^{2k} &= \sum_{i=1}^n y_i x_i^k \end{aligned} \right\} (3.12)$$

Решив систему (3.12) одним из известных методов, определим параметры зависимости $y = a_0 + a_1x + a_1x^2 + \dots + a_kx^k$

4 ЧИСЛЕННОЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ И ИНТЕГРИРОВАНИЕ

4.1 Численное интегрирование

Численное вычисление определенного интеграла называют механически квадратурой. Формулы, соответствующие тому или иному численному методу приближенного интегрирования, называют квадратурными. Подобное название связано с геометрическим смыслом определенного интеграла: значение определенного интеграла

$$y = \int_b^a f(x)dx, f(x) \geq 0 \quad (4.1)$$

равно площади квадрата, которая, в свою очередь, совпадает с площадью криволинейной трапеции с основаниями $[a;b]$ и $f(x)$.

4.1.1 Интегрирование по методу прямоугольников

Интегрирование по методу прямоугольников заключается в том, что интервал интегрирования $[a;b]$ делится точками x_0, x_1, \dots, x_n на n равных частей (рис. 4.1), причем

$$x_0=a, \quad x_n=b,$$

длина каждой части составляет

$$h = (b - a) / n,$$

и тогда

$$x_i = x_0 + ih, i = 1, \dots, n - 1.$$

Из каждой точки x проведем перпендикуляр до пересечения с кривой $f(x)$, а затем заменим кривую подынтегральной функции ломаной линией, отрезки которой параллельны оси абсцисс.

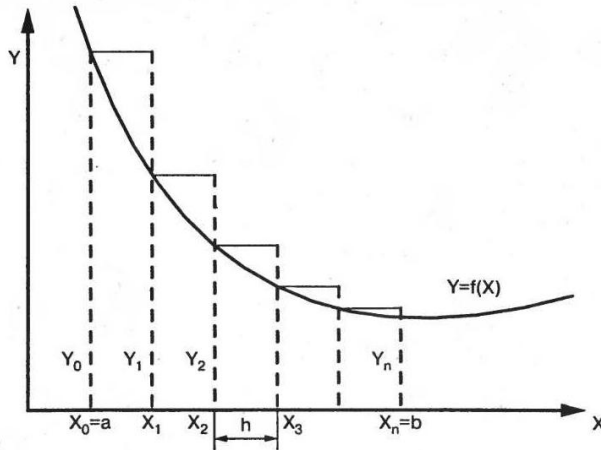


Рис. 4.1. Графическая интерпретация метода левых прямоугольников

Площадь полученной ступенчатой фигуры можно найти как сумму площадей прямоугольников, стороны которых равны h и y_i . Следовательно, площадь отдельного прямоугольника составит

$$S_i = y_i \cdot h,$$

тогда

$$\begin{aligned} S &= \int_a^b f(x) dx \approx y_0 h + y_1 h + y_2 h + \dots + y_{n-1} h = \\ &= f(x_0)h + f(x_1)h + f(x_2)h + \dots + f(x_{n-1})h \end{aligned} \quad (4.2)$$

Следовательно, формула вычисления определенного интеграла по методу прямоугольников имеет вид:

$$I = \int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=1}^n f(x_{i-1}). \quad (4.3)$$

Формулу (4.3) называют еще квадратурной формулой левых прямоугольников. Поясним почему. Рассмотрим другую геометрическую интерпретацию метода прямоугольников, изображенную на рис. 4.2. В этом случае площадь ступенчатой фигуры будем вычислять так:

$$S = \int_a^b f(x) dx \approx y_1 h + y_2 h + \dots + y_n h = f(x_1)h + f(x_2)h + \dots + f(x_n)h$$

Из чего вытекает квадратурная формула правых прямоугольников:

$$I = \int_a^b f(x) dx = h \sum_{i=1}^n f(x_i). \quad (4.4)$$

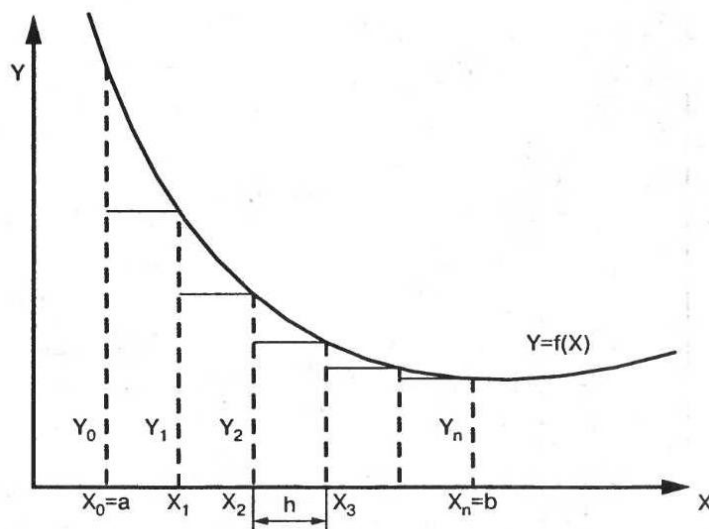


Рис. 4.2. Графическая интерпретация метода правых прямоугольников

Рис. 4.3 содержит еще один пример геометрической интерпретации интегрирования по методу прямоугольников.

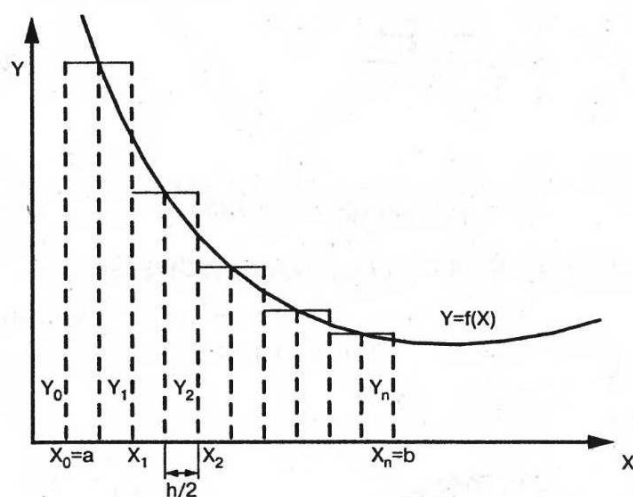


Рис. 4.3. Графическая интерпретация метода средних прямоугольников

Идея этого метода заключается в том что значение функции вычисляется в точке, расположенной в середине отрезка $[x_{i-1}, x_i]$, то есть

$$x_{i-1} + \frac{h}{2} = x_i - \frac{h}{2}.$$

Из чего вытекает квадратурная формула средних прямоугольников:

$$I = \int_a^b f(x)dx = h \sum_{i=1}^n f\left(x_{i-1} + \frac{h}{2}\right) = h \sum_{i=1}^n f\left(x_i - \frac{h}{2}\right). \quad (4.5)$$

Формула (4.5) имеет большую точность по сравнению с (4.3) и (4.4), поэтому именно ее применяют чаще всего и называют формулой прямоугольников.

С точки зрения алгоритмизации метод прямоугольников достаточно прост. Необходимо выполнить следующие действия:

1. Определить шаг разбиения интервала $[a; b]$.
2. Рассчитать сумму значений функции в соответствующих точках интервала
3. Получить результат, умножив полученную сумму на значение шага.

Блок-схемы вычисления определенного интеграла по всем трем квадратным формулам прямоугольников показаны на рис. 4.4.

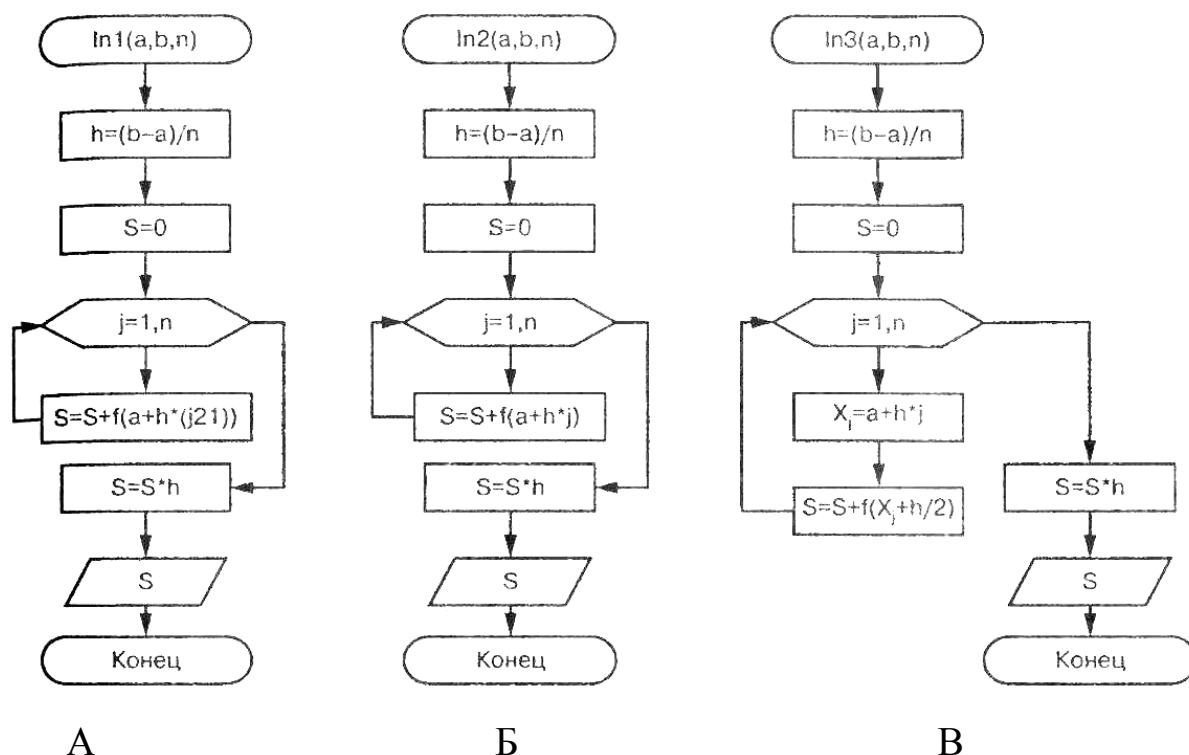


Рис. 4.4 Алгоритмы методов а) левых прямоугольников; б) правых прямоугольников; в) средних прямоугольников

4.1.2 Интегрирование по методу трапеций

Для интегрирования методом трапеций участок интегрирования $[a; b]$ также разбивают на n равных частей. Если провести ординаты во всех точках деления и заменить каждую из полученных криволи-

нейных трапеций прямолинейной (рис. 4.5), то приближенное значение интеграла будет равно сумме площади прямолинейных трапеций.

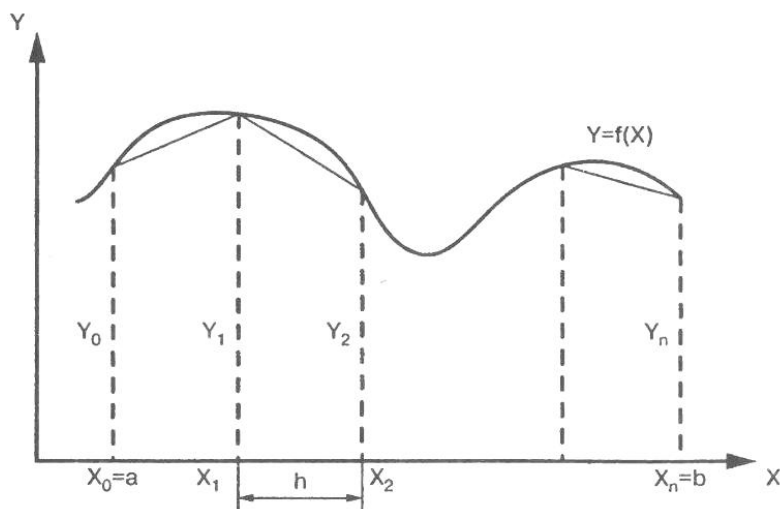


Рис. 4.5. Геометрическая интерпретация метода трапеций

Площадь отдельной трапеции составляет:

$$S = \frac{y_{i-1} + y_i}{2} \cdot h,$$

следовательно, площадь искомой фигуры вычисляют по формуле:

$$S = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n S_i = \frac{h}{2} \sum_{i=1}^n (y_{i-1} + y_i) = h \cdot \left(\frac{y_0 + y_n}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} y_i \right).$$

Таким образом, получена квадратурная формула трапеций для численного интегрирования:

$$I = \int_a^b f(x)dx = h \cdot \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right) \quad (4.6)$$

Рис. 4.6 содержит алгоритм, реализующий численное интегрирование по квадратурным формулам трапеций.

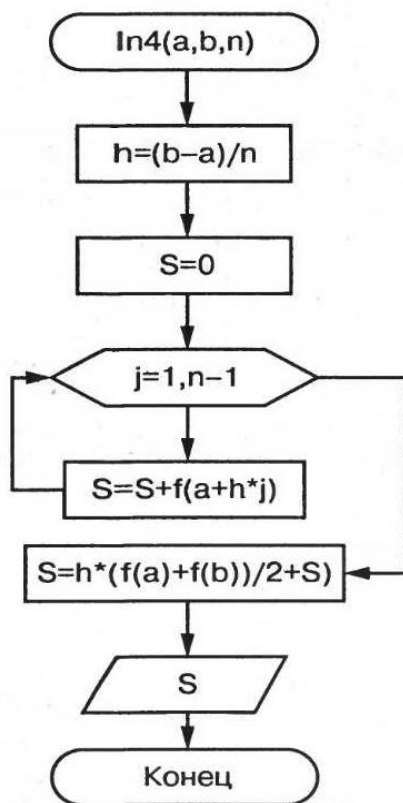


Рис. 4.6. Алгоритмы метода трапеций

4.1.3 Интегрирование по методу Симпсона

Пусть $n=2m$ – четное число, а $y_i=f(x_i)$ ($i=0, \dots, n$) – значения функции $y=f(x)$ для равноотстоящих точек $a=x_0, x_1, x_2, \dots, x_n=b$ с шагом $h=(b-a)/n=(b-a)/2m$. На паре соседних участков (рис. 4.7) кривая $y=f(x)$ заменяется параболой $y=L(x)$, коэффициенты которой подобраны так, что она проходит через точки y_0, y_1, y_2 .

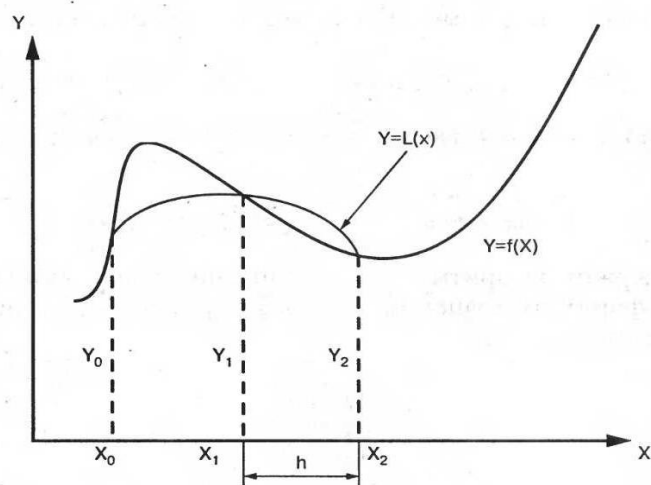


Рис. 4.7. Геометрическая интерпретация интегрирования по методу Симпсона

Площадь криволинейной трапеции, ограниченной параболой составит:

$$S_1 = \frac{h}{3}(y_{i-1} + 4y_1 + y_{i+1})$$

Суммируя площади всех криволинейных трапедий, получим:

$$S = \int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3}(y_0 + 4y_1 + 2y_2 + 4y_3 + \dots + 2y_{2m-2} + 4y_{2m-1} + y_{2m}) =$$

$$= \frac{h}{3} \left(y_0 + y_{2m} + \sum_{i=1}^{2m-1} p \cdot y_i \right),$$

где $p=6-p$. При первом суммировании $p=4$. Следовательно, формула Симпсона для численного интегрирования имеет вид:

$$I = \int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} \left(f(a) + f(b) + \sum_{i=1}^{2m-1} p \cdot y_i \right).$$

Вычислительный алгоритм метода Симпсона выглядит так, как показано на рис. 4.8.

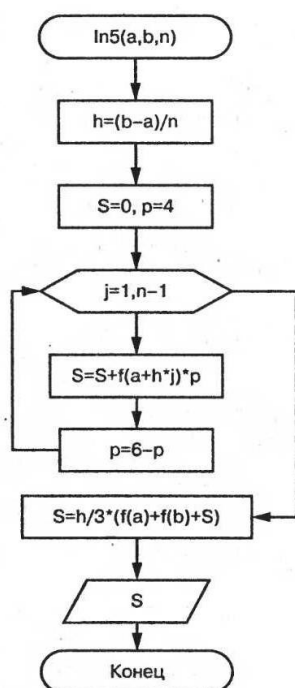


Рис. 4.8. Алгоритм метода Симпсона

4.1.4 Квадратурные формулы Гаусса

Вернемся к общему виду квадратурной формулы для функции, заданной на промежутке $[-1;1]$

$$\int_{-1}^1 f(t)dt = \sum_{i=1}^n A_i \cdot f(t_i). \quad (4.7)$$

Попытаемся найти коэффициенты A_i и узловые точки t_i таким образом, чтобы квадратурная формула (4.7) была точной для всех полиномов $f(t)$ степени $2n-1$:

$$f(t) = 1, t, t^2, \dots, t^{2n-1}.$$

В этом случае построение квадратурной формулы вида (4.7) приводит к определению A_i и t_i из нелинейной системы уравнений $2n$ уравнений:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n A_i = 2, \\ \sum_{i=1}^n A_i \cdot t_1 = 0, \\ \dots\dots\dots \\ \sum_{i=1}^n A_i \cdot t_1^{2n-2} = \frac{2}{2n-1}, \\ \sum_{i=1}^n A_i \cdot t_1^{2n-1} = 0. \end{array} \right. \quad (4.8)$$

Решение полинома нелинейной системы (4.8) задача нетривиальная, но ее можно обойти, если знать, что значениями t_i квадратурной формулы (4.7) служат корни многочлена Лежандра $P_n(t)$:

$$P_n(t) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \cdot \frac{d^n}{dt^n} ((t^2 - 1)^n), (n = 0, 1, 2, \dots). \quad (4.9)$$

Как известно, корни полинома (4.9) существуют при любом n , различны и принадлежат интервалу $[-1;1]$.

Значения A_i вычисляют интегрированием базисных многочленов Лежандра $P_i(t)$ степени $n-1$:

$$A_i = \int_{-1}^1 \frac{(t - t_1) \dots (t - t_{i-1}) \cdot (t - t_{i+1}) \dots (t - t_n)}{(t_i - t_1) \dots (t_i - t_{i-1}) \cdot (t_i - t_{i+1}) \dots (t_i - t_n)} dt. \quad (4.10)$$

Итак, выражение (4.7) или

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2} \cdot \sum_{i=1}^n A_i \cdot f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot t_i\right), \quad (4.11)$$

где t_i – корни полинома (4.9), а A_i определяется из (4.10), называют квадратурной формулой Гаусса. Для удобства практического применения квадратурной формулы Гаусса значения t_i и A_i для $n=2,3,4,5$ приведены в таблице 4.1.

Таблица 4.1. Значения t_i и A_i в формуле Гаусса

n	I	t_i	A_i
2	1;2	± 0.577350	1
3	1;3	± 0.707107	5/9
	2	0	8/9
4	1;4	± 0.794654	0.347855
	2;3	± 0.187592	0.652145
5	1;5	± 0.832498	0.236927
	2;4	± 0.374541	0.478629
	3	0	0.568889

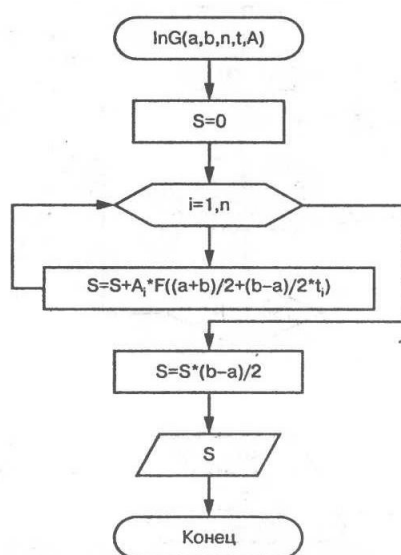


Рис. 4.9. Алгоритм интегрирования по Гауссу

4.2 Численное дифференцирование

Выполнить аналитическое вычисление значения производной заданной функции $f(x)$ в некоторой точке z не столь актуальная задача по сравнению с численным интегрированием. Тем не менее в практических задачах довольно часто требуется вычислить производные разных порядков от функций, заданных таблично или имеющих сложное аналитическое выражение. В этих случаях используют приближенное дифференцирование.

Практически все формулы приближенного дифференцирования основаны на том, что данную функцию $f(x)$ на отрезке $[a; b]$ заменяют интерполирующим полиномом $P(x)$, а затем полагают

$$f'(x) = P'(x), a \leq x \leq b.$$

Запишем интерполяционный полином Ньютона (см. раздел 3.1.2) для данной функции $y = f(x)$,

Если известно, что $x_i = x_0 + ih (i = 0, 1, \dots, n)$ и $y_i = f(x_i)$, а также определены конечные разности $\Delta^k y_i$:

$$f(x) = y_0 + q\Delta y_0 + \frac{q(q-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \frac{q(q-1)(q-2)}{3!}\Delta^3 y_0 + \dots + \frac{q(q-1)\dots(q-n+1)}{n!}\Delta^n y_0,$$

где

$$q = \frac{x - x_0}{h}, h = x_{i+1} - x_i (i = 0, 1, \dots).$$

Так как

$$\frac{dy}{dx} = \frac{dy}{dq} \cdot \frac{dq}{dx} = \frac{1}{h} \cdot \frac{dy}{dq},$$

То получаем конечноразностную формулу численного дифференцирования:

$$f'(x) = \frac{1}{h} \cdot \left(\Delta y_0 + \frac{2q-1}{2}\Delta^2 y_0 + \frac{3q^2-6q+2}{6}\Delta^3 y_0 + \frac{4q^3-18q^2+22q-6}{24}\Delta^4 y_0 + \dots \right). \quad (4.12)$$

Если требуется найти произвольную функцию в основных табличных точках x_i , то формула (4.12) упрощается, так как каждое табличное значение можно принять за начальное, то есть $x=x_0, q=0$:

$$f'(x) = \frac{1}{h} \cdot \left(\Delta y_0 - \frac{\Delta^2 y_0}{2} + \frac{\Delta^3 y_0}{3} - \frac{\Delta^4 y_0}{4} + \frac{\Delta^5 y_0}{5} - \dots \right).$$

Построим интерполяционный полином Лагранжа (см. раздел 3.1.3) для равноотстоящих точек x_i , таких что $x_{i+1} - x_i = h (i=0, 1, 2, \dots, n-1)$:

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n P_i(x) \cdot y_i,$$

где

$$P_i(x) = \frac{(x-x_0) \cdot (x-x_1) \dots (x-x_{i-1}) \cdot (x-x_{i+1}) \dots (x-x_n)}{(x_i-x_0) \cdot (x_i-x_1) \dots (x_i-x_{i-1}) \cdot (x_i-x_{i+1}) \dots (x_i-x_n)}$$

Введем замену $x = x_0 + qh$ и перепишем полином Лагранжа в соответствии с ней:

$$L_n(x_0 + qh) = \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-1} \cdot y_i}{i!(n-i)!} \cdot \frac{q \cdot (q-1) \dots (q-n)}{q-i}.$$

Отсюда, учитывая, что

$$\frac{dx}{dq} = h,$$

Получаем формулу численного дифференцирования:

$$y'(x) = L'_n(x) = \frac{1}{h} \cdot \sum_{i=0}^n \frac{(-1)^{n-1} \cdot y_i}{i!(n-1)!} \cdot \frac{d}{dq} \cdot \frac{q \cdot (q-1) \dots (q-n)}{q-i} \quad (4.13)$$

Проведем расчет по формуле (4.13) для трех точек (n=2):

$$y'(x) = L'_n(x) = \frac{1}{h} \left(\frac{1}{2} y_0 (2q-3) - y_1 (2q-2) + \frac{1}{2} y_2 (2q-1) \right).$$

Таким образом, для производных $y(x_i) = y_i (i = 0, 1, 2)$ получим

$$y'_0 = \frac{1}{2h} \cdot (-3y_0 + 4y_1 - y_2),$$

$$y'_1 = \frac{1}{2h} \cdot (-y_0 + y_2),$$

$$y'_2 = \frac{1}{2h} \cdot (y_0 - 4y_1 + 3y_2),$$

При вычислении производных высших порядков поступают аналогично.

5. РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Настоящая глава посвящена методам решения нелинейных уравнений

$$f(x)=0 \quad (5.1)$$

где $f(x)$ - заданная функция действительного или комплексного аргумента. Причем если $f(x)$ - многочлен, отличный от нулевого, то уравнение (5.1) называют *алгебраическим*, иначе - *трансцендентным*. Большинство этих методов предполагает, что известны достаточно малые окрестности, в каждой из которых имеется только один корень уравнения. Принимая за начальное приближение корня одну из точек этой окрестности, можно вычислить искомый корень с заданной точностью. Таким образом, задача приближенного вычисления корней уравнения (5.1) распадается на две:

- отделение корней уравнения, то есть отыскание достаточно тесных промежутков, в каждом из которых содержится только один корень уравнения;

- вычисление корня с заданной точностью, если известно некоторое начальное его приближение в области, не содержащей других корней.

Однако существуют специальные методы решения алгебраических уравнений, которые не требуют знания начального приближения корня.

Трансцендентные функции - аналитические функции, не являющиеся алгебраическими, например показательные, логарифмические, тригонометрические и т.п.

В следующих разделах кратко описаны некоторые элементарные способы отделения корней, рассмотрены методы уточнения корней по известным начальным приближениям и особое внимание уделено методам, предназначенным для решения алгебраических уравнений.

5.1 Локализация (отделение) корней

Графические методы решения нелинейных уравнений - одни из самых простых. Однако применять их можно лишь для грубой оценки

корней. С другой стороны, графические методы можно использовать для решения задачи отделения корней.

Суть графического метода решения нелинейных уравнений состоит в следующем. Необходимо построить график функции $y=f(x)$, а затем найти абсциссы точек пересечения этого графика с осью x , которые и будут приближенными значениями действительных корней уравнения. На рис. 5.1 видно, что функция четырежды пересекает ось абсцисс, следовательно, уравнение имеет соответствующее число корней. Расположены корни на интервалах $[-0.5; 0]$, $[0; 0.5]$, $[1.5; 2]$ и $[2; 2.5]$.

Иногда бывает удобнее представить уравнение, показанное на рис. 5.1 в виде

$$\Phi(x) = \Psi(x),$$

где функции $\Phi(x)$ и $\Psi(x)$ более простые, чем $f(x)$. Тогда найти приближенные значения корней уравнения можно, определив абсциссы точек пересечения графиков $\Phi(x)$ и $\Psi(x)$. На рис 5.2 приведен пример графического решения уравнения

$$(\sqrt[3]{(x-1)^2} - \sqrt[3]{x^2} = 0) \Rightarrow (\sqrt[3]{(x-1)^2}) = \sqrt[3]{x^2}$$

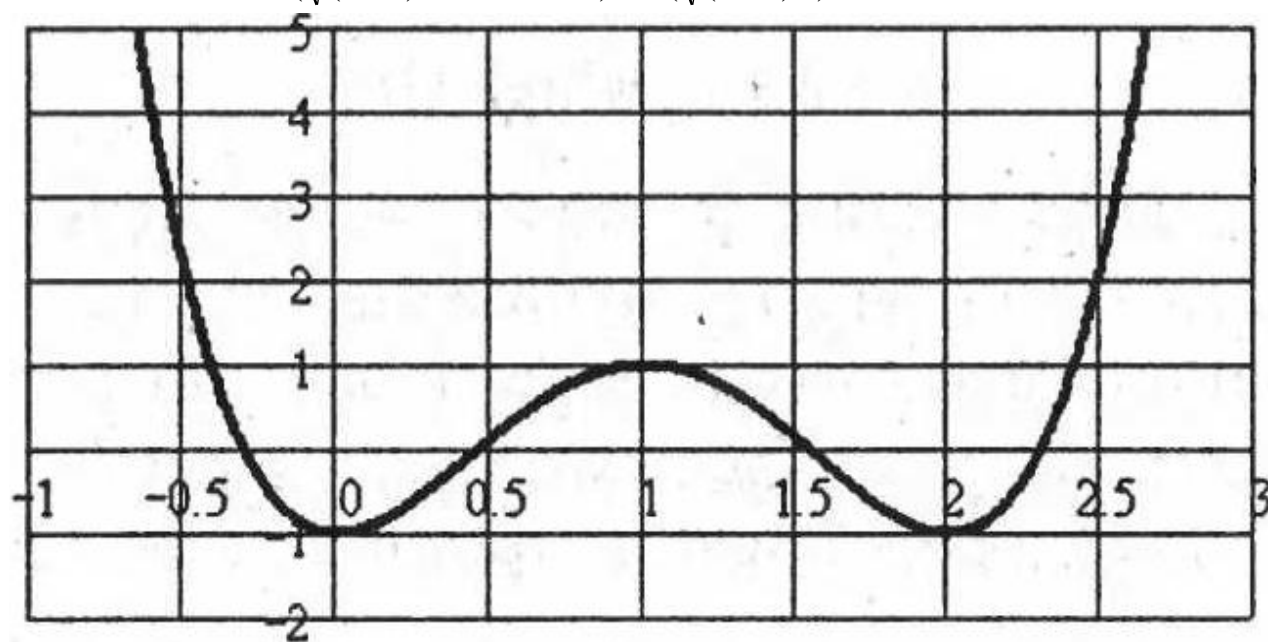


Рис. 5.1 Графическое решение уравнения $y=f(x)$

Несложно заметить, что корень уравнения находится на интервале от нуля до единицы.

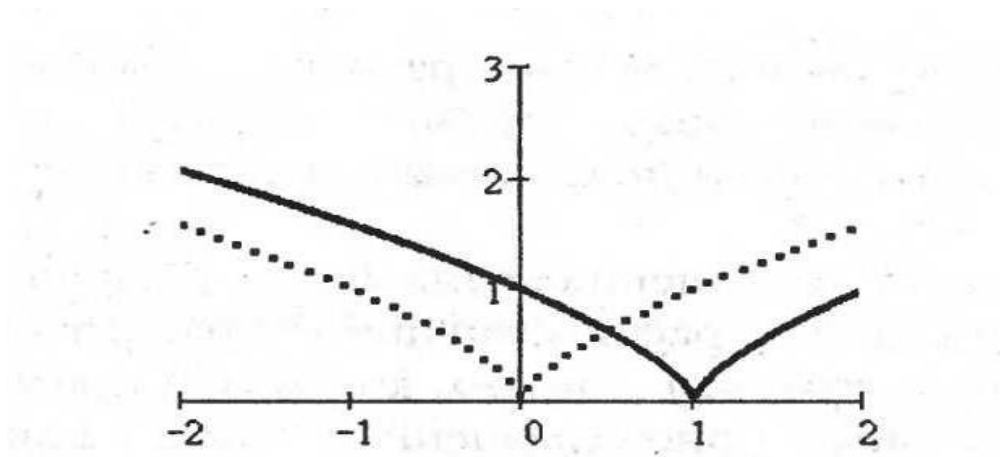


Рис. 5.2 Графическое решение уравнения $\Phi(x) = \Psi(x)$

Для отыскания комплексных корней уравнения $f(z) = 0$ можно, положив $z = x + iy$, где

$i^2 = -1$, представить уравнение в виде:

$$\Phi(x, y) + i \times \Psi(x, y) = 0, \quad (5.2)$$

где $\Phi(x, y)$ и $\Psi(x, y)$ - действительные функции действительных аргументов x и y . Построив кривые $\Phi(x, y) = 0$ и $i \times \Psi(x, y) = 0$ и отыскав абсциссы и ординаты их точек пересечения, получим действительные и мнимые части корней уравнения $f(z) = 0$. Например, уравнение $z^2 + 2 \cdot z + 5 = 0$ действительных корней не имеет. Попробуем отыскать комплексные корни. Приведем уравнение к виду (5.2):

$$(x + i \cdot y)^2 + 2 \cdot (x + i \cdot y) + 5 = 0 \Rightarrow (x^2 - y^2 + 2 \cdot x + 5) + 2 \cdot i \cdot (x \cdot y + y) = 0$$

Таким образом, задача свелась к построению графиков функций

$$\Phi(x, y) = x^2 - y^2 + 2 \cdot x + 5 = 0 \quad \text{и} \quad \Psi(x, y) = x \cdot y + y = 0$$

Для удобства построения проведем элементарные преобразования и получим уравнения линий

$$y = \pm(x^2 + 2x + 5)^{1/2} \quad \text{и} \quad x = -1$$

На рис. 5.3 изображено графическое решение уравнения $x^2 + 2x + 5 = 0$

Несложно заметить, что линии пересекаются в двух точках: $(-1; 2)$ и $(-1; -2)$, следовательно, уравнение имеет два комплексных корня: $x = -1 + 2i$ и $x = -1 - 2i$.

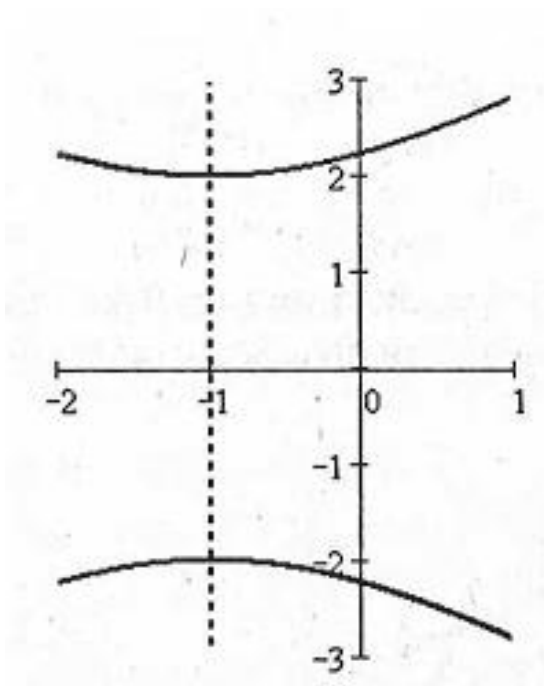


Рис. 5.3 Графическое решение уравнения $f(z) = 0$

Для выделения интервалов, в которых находятся действительные корни уравнения $f(x) = 0$, если $f(x)$ - Непрерывная функция¹, можно воспользоваться следующими предположениями:

- если на концах некоторого отрезка $[a, b]$ непрерывная функция $f(x)$ принимает значения разных знаков $f(a) \cdot f(b) < 0$, то на этом отрезке уравнение $f(x) = 0$ имеет хотя бы один корень, при этом отрезок $[a; b]$ называют интервалом изоляции корня, а значения a и b называют пределами интервала изоляции,

- если при этом функция $f(x)$ имеет первую производную, не меняющую знака, то корень единственный.

Теперь, когда нам известно, как определить интервалы изоляции корней уравнения (отделить корни), рассмотрим методы вычисления корней с заданной точностью (уточнение корней).

5.2 Метод половинного деления (дихотомии)

Метод половинного деления (дихотомии) заключается в следующем. Пусть дано уравнение $f(x) = 0$, где функция $f(x)$ непрерывна на $[a; b]$ и $f(a) \cdot f(b) < 0$. Для отыскания корня уравнения $f(x) = 0$ принадлежащего отрезку $[a; b]$, этот отрезок необходимо поделить пополам и принять за первое приближение корня точку c , которая является

серединой отрезка $[a; b]$. Далее из двух отрезков - $[a; c]$ и $[c; b]$ - выбирается тот, на концах которого функция $f(x)$ имеет противоположные знаки. Это будет означать сужение интервала изоляции корня уравнения $f(x) = 0$. Новый суженный отрезок снова делится пополам, и проводятся аналогичные вычисления. Графическая интерпретация метода половинного деления приведена на рис. 5.4.

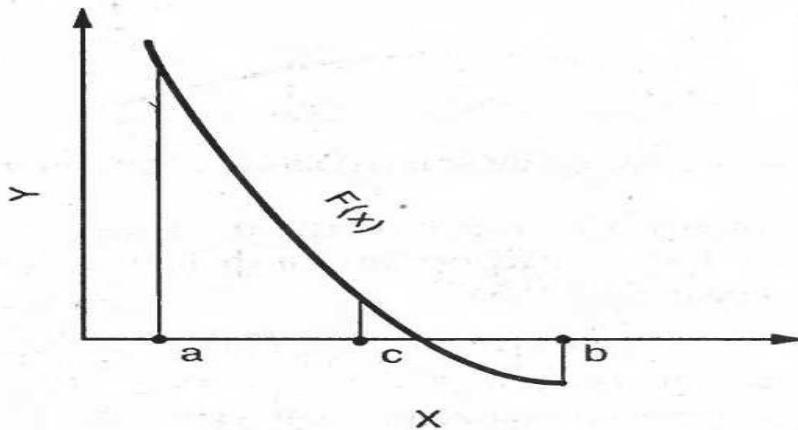


Рис. 5.4 Графическая интерпретация метода половинного деления

Метод половинного деления легко реализуется в виде следующего алгоритма (блок-схема приведена на рис. 5.5):

1. Находим точку $c = \frac{a+b}{2}$
2. Если $f(a) \cdot f(c) < 0$, то корень лежит на интервале $[a; c]$, если иначе - корень лежит на интервале $[c; b]$.
3. Если величина интервала не превышает некоторое достаточно малое число ϵ , то найден корень с точностью ϵ , иначе возвращаемся к п.1.

Однако, несмотря на простоту, такое последовательное сужение интервала проводится редко, так как требует слишком большого количества вычислений. Кроме того, этот способ не всегда позволяет найти решение с заданной точностью. С другой стороны, его можно использовать как один из методов отделения корней.

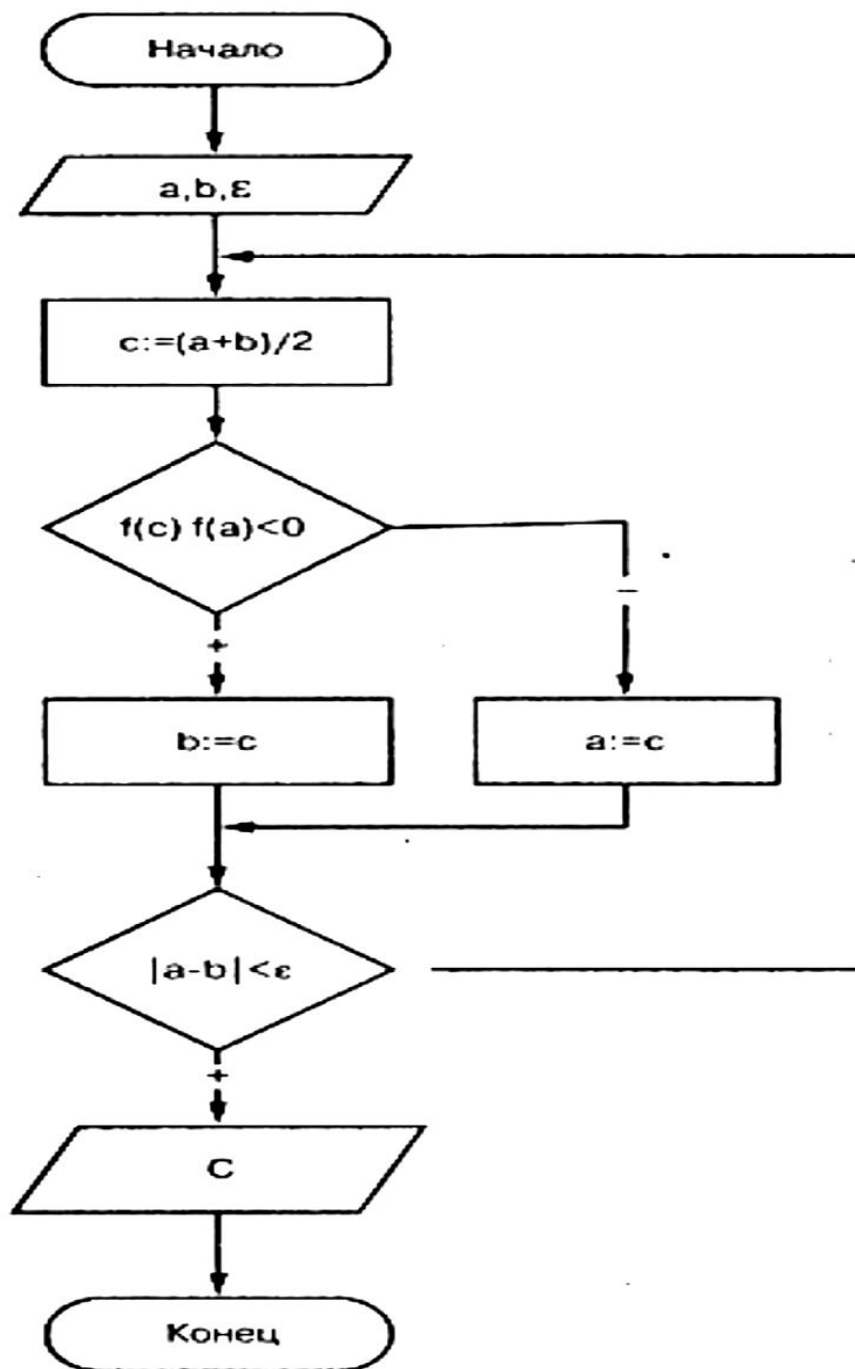


Рис. 5.5 Алгоритм решения уравнения методом дихотомии

5.3 Метод хорд (пропорциональных частей)

Рассмотрим более быстрый способ (в отличие от метода дихотомии) нахождения корня уравнения $f(x) = 0$, лежащего на интервале $[a; b]$, таком, что $f(a) \cdot f(b) < 0$. Идея метода хорд состоит в следую-

щем. Вместо того чтобы делить отрезок $[a; b]$ пополам (см. метод дихотомии), разделим его в отношении $f(a) : f(b)$. Таким образом, первое приближение корня $x=c$ находится в точке пересечения отрезка $[a; b]$ хордой, проходящей через точки $(a; f(a))$ и $(b; f(b))$

Далее, применяя этот прием к тому из отрезков $[a; c]$ или $[c; b]$, на концах которого функция имеет противоположные знаки, получим следующее приближение корня (рис. 5.6).

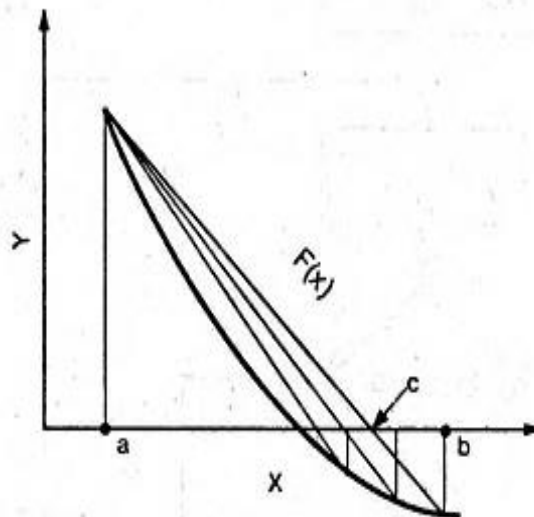


Рис. 5.6 Графическая интерпретация метода хорд

Выведем формулу для вычисления приближенного значения c корня уравнения $f(x) = 0$. Запишем уравнение прямой, проходящей через точки с координатами $(a; f(a))$ и $(b; f(b))$

$$\frac{y - f(a)}{f(b) - f(a)} = \frac{x - a}{b - a} \quad \frac{f(b) - f(a)}{b - a} \cdot (x - a) + f(a) = y \quad (5.3)$$

Прямая, заданная уравнением (5.3), пересекает ось X при условии $y = 0$. Найдем точку пересечения хорды с осью X

$$\frac{f(b) - f(a)}{b - a} \cdot (x - a) + f(a) = 0, \quad x = a - \frac{f(a) \cdot (b - a)}{f(b) - f(a)}$$

Итак,

$$c = a - \frac{f(a)}{f(b) - f(a)} \cdot (b - a) \quad (5.4)$$

Алгоритм, реализующий метод хорд, можно представить так (блок-схема приведена на рис. 5.7):

1. Находим точку c по формуле (5.4).
2. Если $f(a) \cdot f(c) < 0$, то корень лежит на интервале $[a; c]$, иначе - корень лежит на интервале $[c; b]$.

3. Если абсолютное значение $f(c)$ не превышает некоторое достаточно малое число ϵ , то найден корень с точностью ϵ иначе возвращаемся к п.1.

Заметим, что описанный способ позволяет достаточно быстро (за меньшее количество шагов, чем в методе дихотомии) вычислить значение корня уравнения (5.1) с заданной точностью.

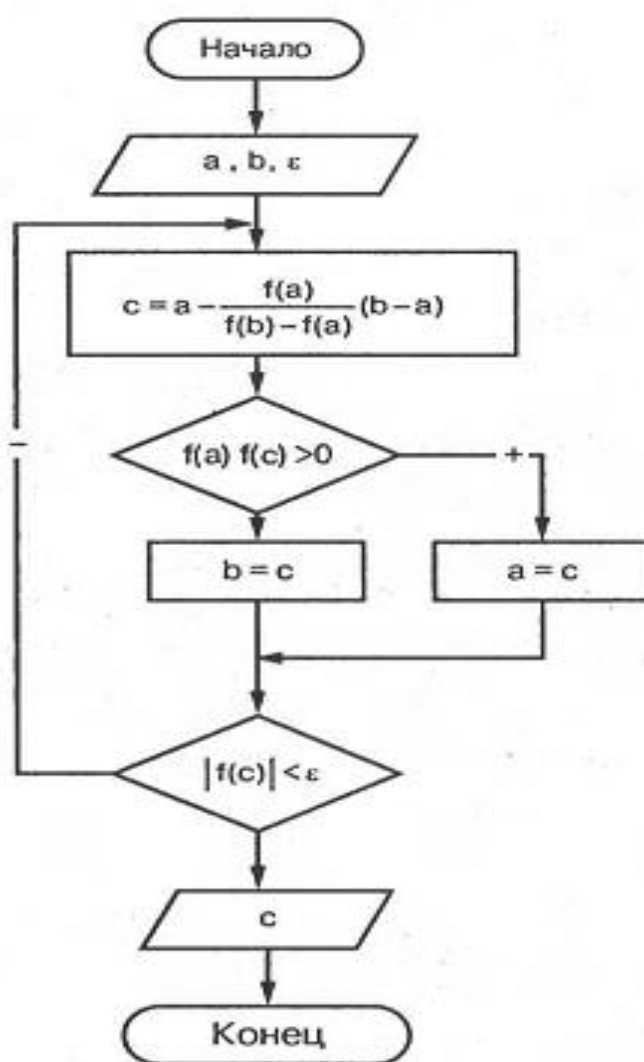


Рис 5.7 Алгоритм метода хорд

5.4 Метод касательных (метод Ньютона)

Пусть корень уравнения $f(x) = 0$ отделен на отрезке $[a, b]$ причем $f(x)$ и $f'(x)$ непрерывны и сохраняют определенные знаки при $a \leq x \leq b$. Вычислив какое-либо приближенное значение корня $x = c$, можно уточнить его при помощи *метода касательных*. Геометриче-

ски метод касательных эквивалентен замене небольшой дуги кривой $y=f(x)$ касательной, проведенной в некоторой точке кривой так, как показано на рис. 5.8.

Пусть $x_0 = b$, причем $f(x_0) \cdot f'(x_0) > 0$. Проведем касательную к кривой $y=f(x)$ в точке $(x_0; f(x_0))$. В качестве начального приближения корня $x_1 = c$ выберем абсциссу точки пересечения этой касательной с осью Ox . Далее проведем касательную через точку $(x_1; f(x_1))$, абсцисса точки пересечения которой с осью Ox даст второе приближение корня x_2 , и так далее до тех пор, пока не будет достигнута точность 'Е'

Уравнение касательной в точке $(c; f(c))$ имеет вид:

$$y - f(c) = f'(c) \cdot (x - c)$$

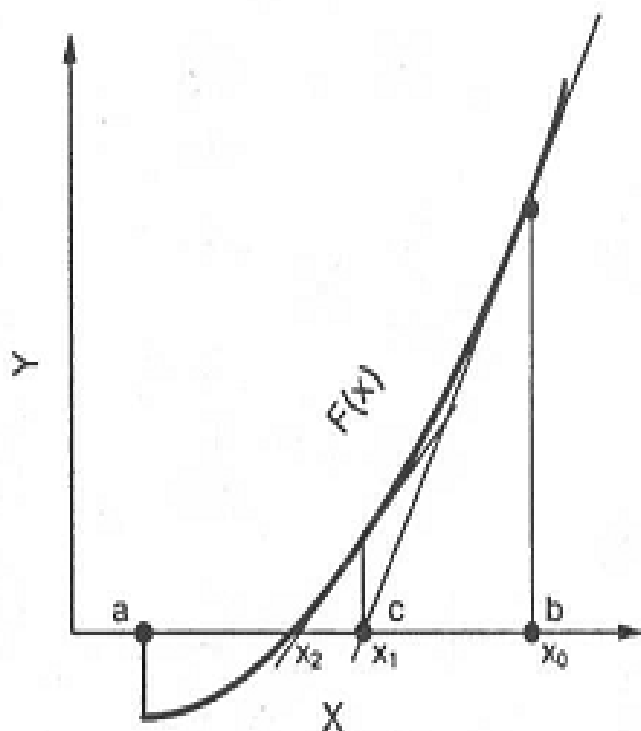


Рис. 5.8 Графическая интерпретация метода касательных

Значит, точку пересечения касательной с осью Ox можно вычислить по формуле

$$x = c - \frac{f(c)}{f'(c)} \quad (5.5)$$

Предположим, что $x_0 = a$, причем $f(x_0) \cdot f'(x_0) < 0$, тогда, проведя касательную (рис. 5.9) к кривой $y=f(x)$ в точке $(x_0; f(x_0))$, получим точку $x_1 = c$, лежащую вне отрезка $[a; b]$. Таким образом, начальное при-

ближение должно находиться в точке x_0 , в которой функция и ее вторая производная не меняют знак, то есть выполняется равенство:

$$f(x_0) \cdot f'(x_0) > 0$$

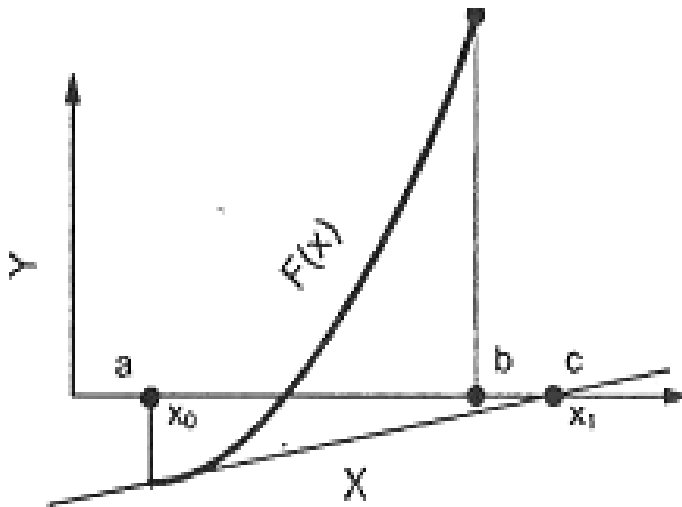


Рис 5.9 Графическая интерпретация метода касательных (случай неверного выбора начального приближения)

Итак, запишем алгоритм метода касательных (блок-схема представлена на рис. 5.10):

1. Определяем начальное приближение: если $f(a) \cdot f'(a) > 0$, то начальное приближение в точке a , иначе - в точке b .
2. Уточняем значение корня по формуле (5.5).
3. Если абсолютное значение функции в найденной точке не превышает некоторое достаточно малое значение ϵ , то корень найден, иначе переходим к п.2.

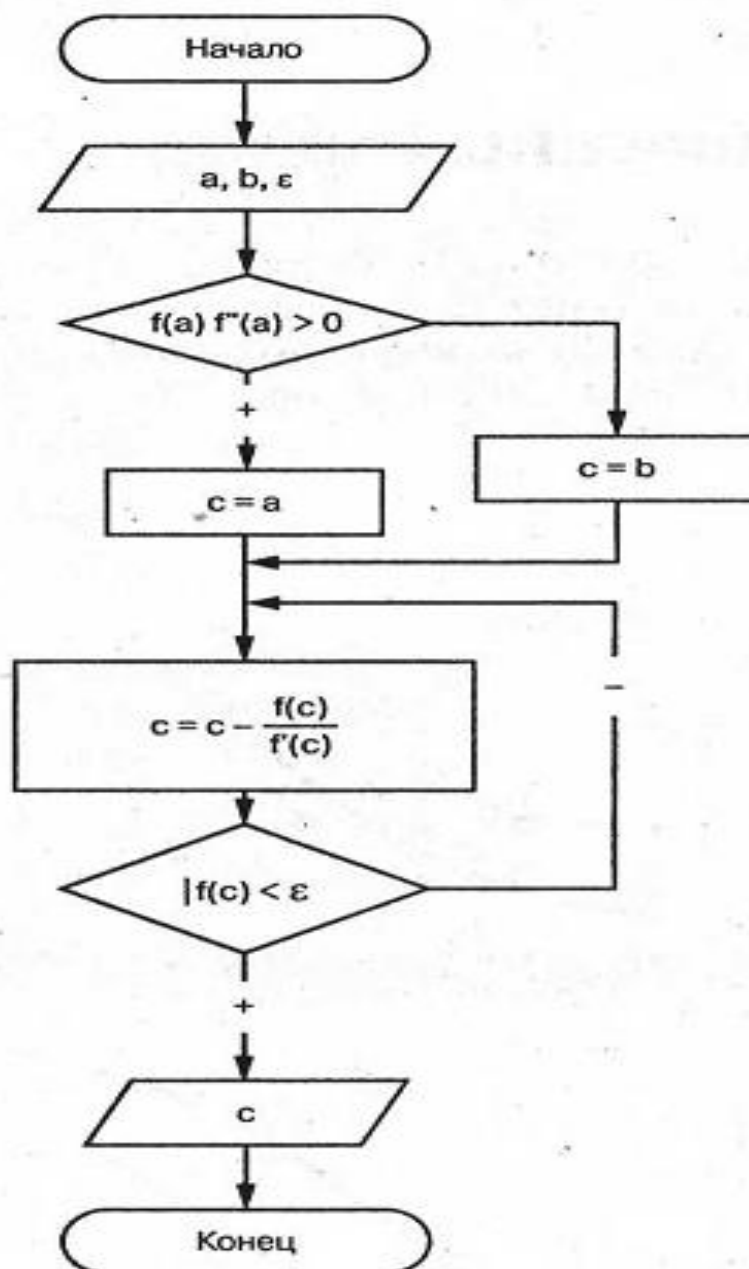


Рис. 5.10 Алгоритм метода Ньютона

Из формулы (5.5) видно, что чем больше численное значение производной $f'(x)$ в окрестности данного корня, тем меньшего уточнения требует n -е приближение. Поэтому метод касательных (Ньютона) удобен, когда в окрестности данного корня график функции имеет большую кривизну. Но если численное значение производной $f'(x)$ в окрестности корня мало, то его уточнение требует больших правок. В этом случае вычисление корня может оказаться достаточно длительным или вообще невозможным. Следовательно, если кривая $y = f(x)$ вблизи точки пересечения с осью Ox почти горизонтальна, то приме-

нять метод Ньютона для решения уравнений вида (5.1) не рекомендуется [4].

5.5 Метод простой итерации (последовательных приближений)

Идея *метода простой итерации* заключается в следующем [4]. Пусть требуется найти корни уравнение $f(x) = 0$, где $f(x)$ - непрерывная функция. Заменим это уравнение равносильным уравнением

$$x = \varphi(x) \quad (5.6)$$

Предположим, что нам известно грубое приближенное значение корня x_0 . Подставим его в правую часть уравнения (5.6) и получим некоторое значение

$$x_1 = \varphi(x_0) \quad (5.7)$$

Теперь подставим вычисленное значение x_1 в правую часть равенства (5.7) и получим новое число $x_2 = \varphi(x_1)$. Повторяя этот процесс, будем иметь последовательность чисел

$$x_n = \varphi(x_{n-1}) \quad , \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (5.8)$$

Если эта последовательность сходящаяся, то есть существует предел $c = \lim_{n \rightarrow \infty} x^n$, то, переходя к пределу в равенстве (5.8) и предполагая функцию $\varphi(x)$ непрерывной, найдем:

$$c = \lim_{n \rightarrow \infty} x^n = \varphi(\lim_{n \rightarrow \infty} x_{n-1}) \Rightarrow c = \varphi(c)$$

Из чего следует, что c - корень уравнения (5.6) и может быть вычислен по формуле (5.8) с любой степенью точности. Вообще, процесс решения нелинейного уравнения методом простой итерации считается завершенным, если два последовательных приближения x_n и x_{n-1} , совпадают между собой с заданной точностью. Геометрически метод простой итерации можно объяснить следующим образом. Построим графики функций $y = x$ и $y = \varphi(x)$ так, как показано на рис. 5.11. Абсцисса c точки пересечения M кривой $y = \varphi(x)$ и прямой $y = x$ - действительный корень уравнения (5.6). Для дальнейших расчетов изобразим ломаную линию $A_0 B_1 A_1 B_2 A_2 \dots$ начиная с некоторой точки $A_0(x_0, \varphi(x_0))$. Вершины ломаной $A_0 A_1 A_2$ лежат на кривой $y = \varphi(x)$, а B_1, B_2, \dots - на прямой $y = x$. Общие абсциссы пар точек B_1

и A_1 , B_2 и A_2 ... представляют собой последовательные приближения x_1, x_2, \dots корня c

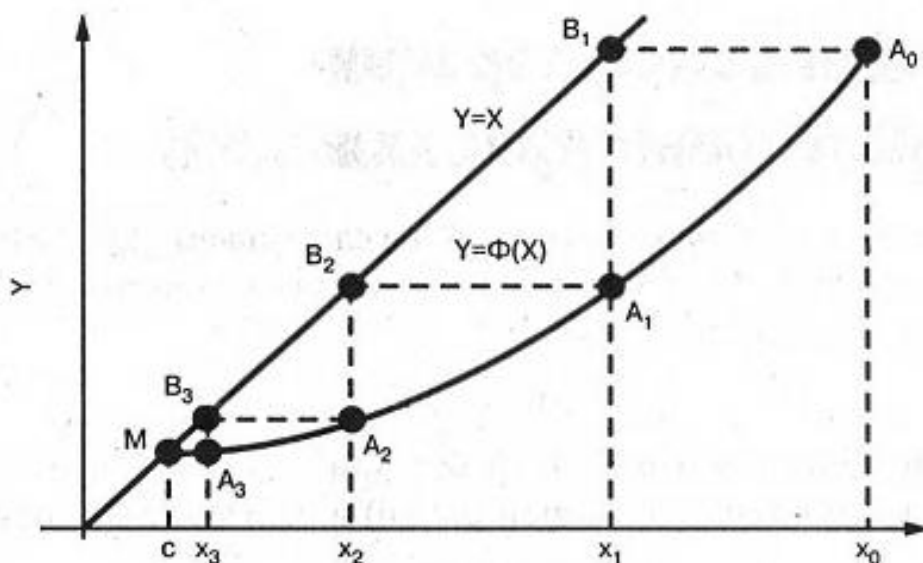


Рис 5.11 Геометрическая интерпретация метода простой итерации для $|\varphi'(x)| < 1$

Обратите внимание, что кривая $y = \varphi(x)$ в окрестности корня c - пологая, то есть $|\varphi'(x)| < 1$ и процесс итерации сходится. На рис. 5.12 представлен случай расходящегося процесса, где $|\varphi'(x)| > 1$.

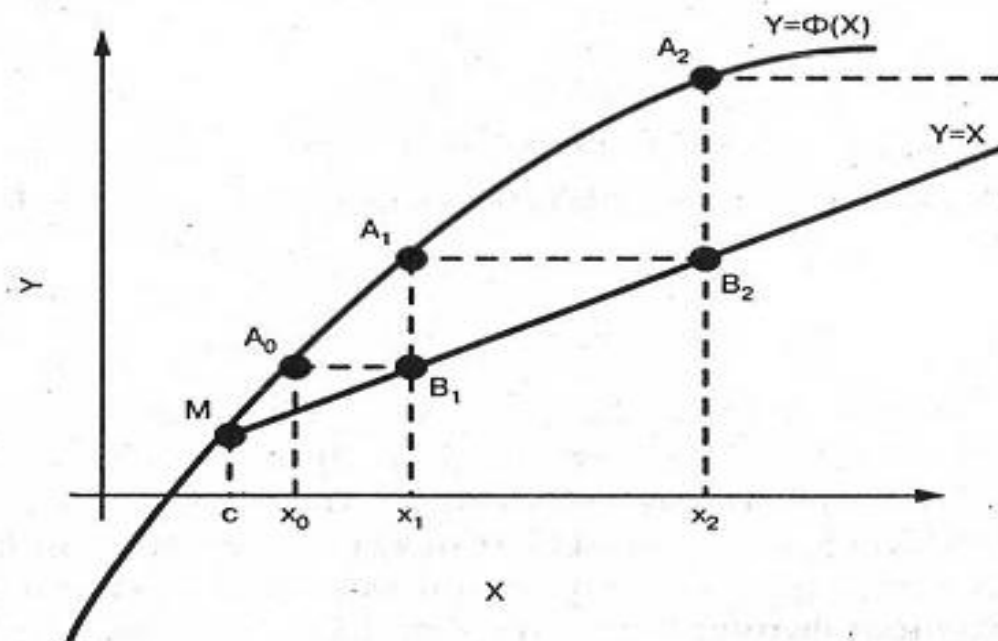


Рис 5.12 Геометрическая интерпретация метода простой итерации для $|\varphi'(x)| > 1$

Для практического применения метода простой итерации следует помнить, что функцию (5.6) нужно представлять таким образом, чтобы было истинным неравенство:

$$|\varphi'(x)| \leq q < 1 \quad (5.9)$$

причем чем меньше число q , тем быстрее последовательные приближения сходятся к корню [4].

Рассмотрим общий прием приведения уравнения (5.1) к виду (5.6), для которого выполнялось бы неравенство (5.9). Пусть искомый корень лежит на отрезке $[a; b]$, причем

$$0 < m \leq f'(x) \leq M \quad (5.10)$$

для $a \leq x \leq b$, где m и M - соответственно наименьшее и наибольшее положительные¹ значения производной $f'(x)$ на отрезке $[a; b]$. Заменим уравнение (5.6) эквивалентным ему уравнением:

$$x = x - \sigma f(x) \Rightarrow \varphi(x) = x - \sigma f(x)$$

для $x > 0$. Подберем X так, чтобы выполнялось неравенство

$$0 \leq \varphi'(x) = 1 - \sigma f'(x) \leq q < 1 \quad (5.11)$$

На основании неравенства (5.10) получим:

$$0 \leq 1 - \sigma \cdot M \leq 1 - \sigma \cdot m \leq q$$

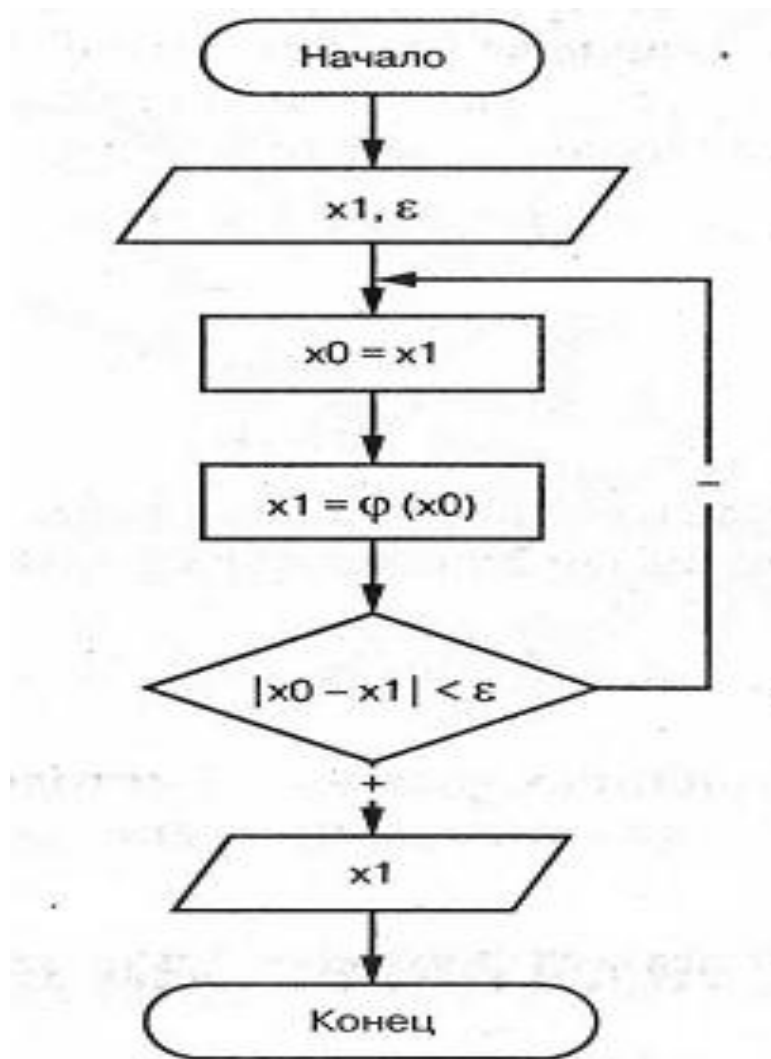


Рис. 5.13 Алгоритм метода простой итерации

Откуда следует, что $\sigma = \frac{1}{M}$ и $q = 1 - m / M < 1$. Таким образом, неравенство (5.11) выполнено.

Вообще, при выполнении условия (5.9) метод простой итерации сходится при любом выборе начального значения x_0 из $[a; b]$. Это свойство делает метод одним из самых надежных вычислительных методов.

Блок-схема метода простой итерации приведена на рис. 5.13.

5.6 Вычисление комплексных корней (метод Вестгейна)

Пусть необходимо вычислить *комплексный корень* уравнения

$$F(z) = 0 \quad (5.12)$$

где $z = x + iy$ и $i^2 = -1$. Для достижения цели воспользуемся методом, аналогичным методу Ньютона (касательных). Предположим, что z_n - приближенное значение корня уравнения (5.12), принадлежащее некоторой окрестности U , в которой функция $f(z)$ определена, а $z_{n+1} = z_n + \Delta z_n$ - уточненное значение корня. Применяя разложение в ряд Тейлора в точке z_n и считая, что $f(z_{n+1}) = 0$, получим:

$$f(z_{n+1}) = f(z_n) + \Delta z_n \cdot f'(z_n) = 0$$

Следовательно:

$$\Delta z_n = -\frac{f(z_n)}{f'(z_n)}$$

Таким образом, если известно некоторое начальное значение z_0 , то дальнейшие приближения корня можно получить, воспользовавшись формулой:

$$z_{n+1} = z_n - \frac{f(z_n)}{f'(z_n)}, \quad (n = 0, 1, 2, 3, \dots) \quad (5.13)$$

Алгоритм решения нелинейных уравнений методом Ньютона рассмотрен в разделе 5.4.

5.7 Метод парабол (метод Мюллера)

Метод Мюллера — итерационный численный метод для решения уравнения $f(x) = 0$ непрерывной функции. Был представлен Давидом Мюллером в 1956 году.

Метод Мюллера развивает идею метода секущих, который строит на каждом шаге итерации прямые, проходящие через две точки на графике f . Вместо этого, метод Мюллера использует три точки, строит параболу, проходящую через эти три точки, и в качестве следующего приближения берёт точку пересечения параболы и оси x .

Три изначально необходимых значения обозначаются как x_k , x_{k-1} и x_{k-2} . Парабола, проходящая через три точки $(x_k, f(x_k))$, $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$ и $(x_{k-2}, f(x_{k-2}))$ по формуле Ньютона записывается следующим образом

$$y = f(x_k) + (x - x_k)f[x_k, x_{k-1}] + (x - x_k)(x_k - x_{k-1})f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}], \quad (5.14)$$

где $f[x_k, x_{k-1}]$ и $f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]$ разделённые разности. Это уравнение можно переписать в виде

$$y = f(x_k) + \omega(x - x_k) + f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}](x - x_k)^2, \quad (5.15)$$

где

$$\omega = f[x_k, x_{k-1}] + f[x_k, x_{k-2}] + f[x_{k-1}, x_{k-2}]$$

Следующая итерация даёт корень квадратного уравнения $y = 0$. Из этого выходит рекуррентная формула

$$x_{k+1} = x_k - \frac{2f(x_k)}{\omega \pm \sqrt{\omega^2 - 4f(x_k)f[x_k, x_{k-1}, x_{k-2}]}}, \quad (5.16)$$

В этой формуле знак выбирается таким образом, чтобы знаменатель был больше по абсолютной величине. Стандартная формула для решения квадратных уравнений не используется, так как это может привести к потере значимых разрядов.

Приближение x_{k+1} может быть комплексным числом, даже если все предыдущие приближения были вещественными, в отличие от других алгоритмов численного поиска корней (метод секущих или метод Ньютона), где приближения будут оставаться вещественными, если начинать с вещественного числа. Наличие комплексных итераций может быть как преимуществом (если вы ищете комплексный корень), так и недостатком (если известно, что все корни вещественные).

6 РЕШЕНИЕ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Дифференциальные уравнения и системы описывают очень многие динамические процессы и используются при решении различных задач физики, электротехники, химии и других наук. Данная глава посвящена численному решению дифференциальных уравнений.

6.1 Общие сведения о дифференциальных уравнениях

Дифференциальным уравнением n -го порядка называется соотношение вида:

$$H(t, x, x', x'', \dots, x^{(n)}) = 0. \quad (6.1)$$

Решением дифференциального уравнения называется функция $x(t)$, которая обращает уравнение в тождество.

Каждое дифференциальное уравнение имеет бесконечное множество решений, которые отличаются друг от друга константами. Для однозначного определения решения необходимо определить дополнительные начальные или граничные условия. Количество таких условий должно совпадать с порядком дифференциальных уравнений. В зависимости от вида дополнительных условий в дифференциальных уравнениях различают:

- *задачу Коши* – в случае, если все дополнительные условия заданы в одной (чаще начальной) точке интервала;
- *краевую задачу* – в случае, когда дополнительные условия заданы на границах интервала.

Различают точные (аналитические) и приближенные (численные) методы решения дифференциальных уравнений. Большое количество уравнений может быть решено точно. Однако есть уравнения, а особенно системы уравнений, для которых нельзя записать точное решение. Но даже для уравнений с известным аналитическим решением очень часто необходимо вычислить числовое значение при определенных исходных данных. Поэтому широкое распространение получили численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений, которые будем рассматривать для следующей задачи Коши. Найдем решение дифференциального уравнения:

$$x' = f(x, t), \quad (6.2)$$

удовлетворяющее начальному условию

$$x(t_0) = x_0. \quad (6.3)$$

Иными словами, требуется найти интегральную кривую $x = x(t)$, проходящую через заданную точку $M_0(t_0, x_0)$ (рис. 6.1).

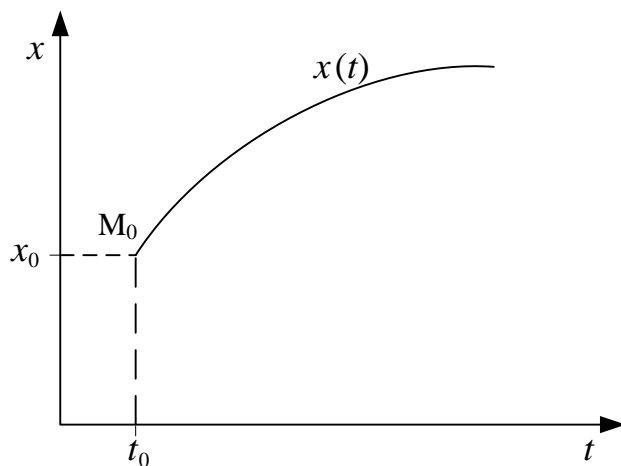


Рис. 6.1 Интегральная кривая $x(t)$, проходящая через точку (t_0, x_0)

Для дифференциального уравнения n -го порядка:

$$x^{(n)} = f(t, x', x'', \dots, x^{(n-1)}) \quad (6.4)$$

задача Коши состоит в нахождении решения $x = x(t)$, удовлетворяющего уравнению (6.4) и начальным условиям:

$$x(t_0) = x_0, x'(t_0) = x'_0, \dots, x^{(n-1)}(t_0) = x_0^{n-1} \quad (6.5)$$

Рассмотрим основные численные методы решения задачи Коши.

6.2 Решение дифференциальных уравнений методом Эйлера

При решении задачи Коши (6.2), (6.3) на интервале $[t_0, t_n]$, выбрав достаточно малый шаг h , построим систему равностоящих точек:

$$h = \frac{t_n - t_0}{n}, t_i = t_0 + ih, i = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (6.6)$$

Для вычисления значения функции в точке t_1 разложим функцию $x = x(t)$ в окрестности точки t_0 в ряд Тейлора:

$$x(t_1) = x(t_0 + h) = x(t_0) + hx'(t_0) + x''(t_0) \frac{h^2}{2} + \dots \quad (6.7)$$

При достаточно малом значении h членами выше второго порядка можно пренебречь, и с учётом $x'(t_0) = f(x_0, t_0)$ получим сле-

дующую формулу для вычисления приближенного значения функции $x(t)$ в точке t_1 :

$$x(t_1) \approx x_1 = x_0 + hf(x_0, t_0). \quad (6.8)$$

Рассматривая найденную точку (x_1, t_1) как начальное условие задачи Коши, запишем аналогичную формулу для нахождения значения функции $x(t)$ в точке t_2 :

$$x_2 = x_1 + hf(x_1, t_1).$$

Повторяя этот процесс, сформируем последовательность значений x_i в точках t_i по формуле:

$$x_{i+1} = x_i + hf(x_i, t_i), i = 1, 2, \dots, n. \quad (6.9)$$

Процесс нахождения значений функции x_i в узловых точках t_i по формуле (6.9) называется методом Эйлера. Геометрическая интерпретация метода Эйлера состоит в замене интегральной кривой $x(t)$ ломаной $M_0, M_1, M_2, \dots, M_n$ с вершинами $M_i (x_i; y_i)$. Звенья ломаной Эйлера $M_i M_{i+1}$ в каждой вершине M_i имеют направление $y_i = f(t_i; x_i)$, совпадающее с направлением интегральной кривой $x(t)$ уравнения (6.4), проходящей через точку M_i (рис. 6.2). Последовательность ломаных Эйлера при $h \rightarrow 0$ на достаточно малом отрезке $[x_i; x_i + h]$ стремится к искомой интегральной кривой.

На каждом шаге решение $x(t)$ определяется с ошибкой за счет отбрасывания членов ряда Тейлора выше первой степени, что в случае быстроменяющейся функции $f(t, x)$ может привести к быстрому накоплению ошибки. В методе Эйлера следует выбирать достаточной малый шаг h . На рис. 6.3 представлена блок-схема решения задачи Коши (6.4)-(6.5) методом Эйлера на интервале $[a; b]$.

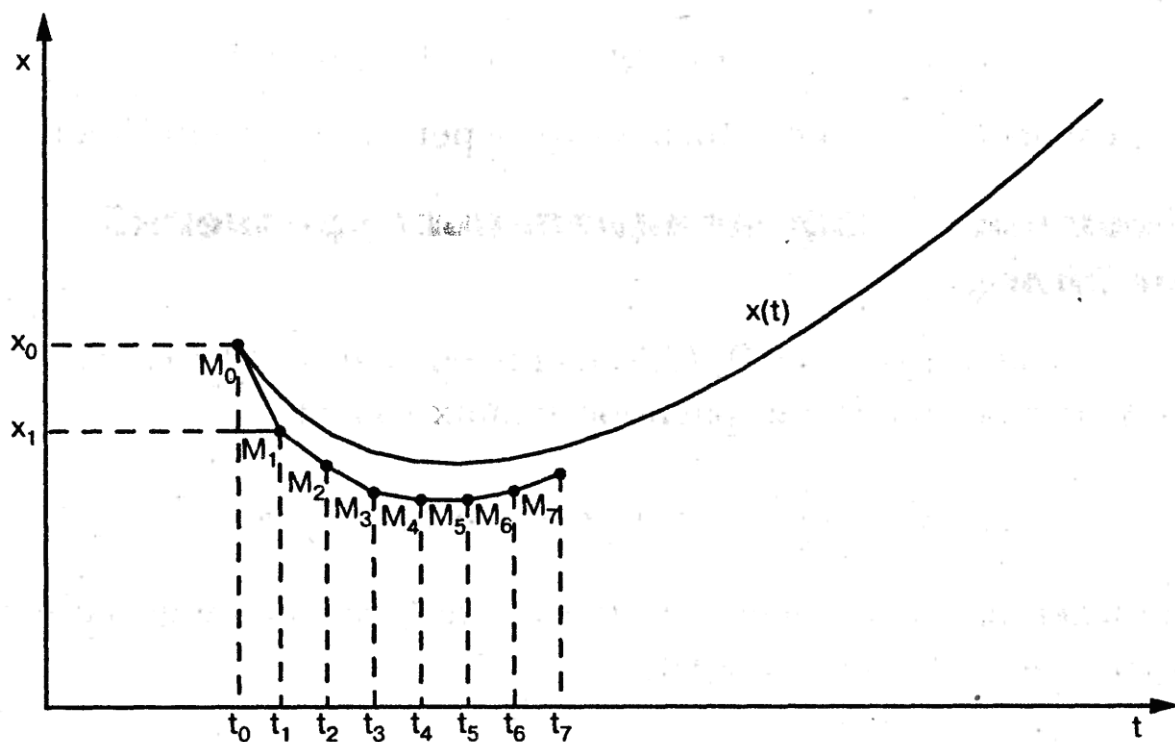


Рис. 6.2 – Геометрическая интерпретация метода Эйлера

При этом, уменьшение шага интегрирования h приводит к повышению точности решения уравнения методом Эйлера.

Метод Эйлера является очень простым методом решения задачи Коши, но недостаточно точным: для его использования нужно выбирать достаточно маленький шаг интегрирования h . В связи с недостаточной точностью метода Эйлера для повышения точности были разработаны его модификации.

6.3 Решение дифференциальных уравнений при помощи модифицированного метода Эйлера

Более точным методом решения задачи (6.2)–(6.3) является модифицированный метод Эйлера, при котором сначала вычисляют промежуточные значения:

$$t_p = t_i + \frac{h}{2}, x_p = x_i + \frac{h}{2} f(t_i, x_i), \quad (6.10)$$

после чего находят значение x_{i+1} по формуле:

$$x_{i+1} = x_i + hf(x_p, t_p), i = 1, 2, \dots, n. \quad (6.11)$$

С помощью модифицированного метода Эйлера можно найти намного более точное решение, чем обычным методом Эйлера.

6.4 Решение дифференциальных уравнений методами Рунге-Кутта

Рассмотренные выше методы Эйлера (как обычный, так и модифицированный) являются частными случаями явного метода Рунге-Кутта k -го порядка. В общем случае формула вычисления очередного приближения методом Рунге-Кутта имеет вид:

$$x_{i+1} = x_i + h\varphi(x_i, t_i, h), i = 1, 2, \dots, n. \quad (6.12)$$

Функция $\varphi(x, t, h)$ приближает отрезок ряда Тейлора до k -го порядка и не содержит частных производных $f(x, t)$ [2].

6.4.1 Метод Рунге-Кутта первого порядка

Метод Эйлера является методом Рунге-Кутта первого порядка ($k = 1$) и получается при $\varphi(x, t, h) = f(x, t)$.

6.4.2 Методы Рунге-Кутта второго порядка

Семейство методов Рунге-Кутта второго порядка имеет вид [2]:

$$x_{i+1} = x_i + h \left((1-a)f(t_i, x_i) + af\left(t_i + \frac{h}{2a}, x_i + \frac{h}{2a} f(t_i, x_i)\right) \right), i = 1, 2, \dots, n. \quad (6.13)$$

Два наиболее известных среди методов Рунге-Кутта второго порядка - это *метод Хорна* ($a=1/2$) и модифицированный метод Эйлера ($a=1$).

Подставив $a=1/2$ в формулу (6.13), получаем расчетную формулу *метода Хорна*:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{2} (f(t_i, x_i) + f(t_i + h, x_i + hf(t_i, x_i))), i = 1, 2, \dots, n. \quad (6.14)$$

Подставив $a=1$ в формулу (6.13), получаем расчетную формулу уже рассмотренного выше модифицированного метода Эйлера:

$$x_{i+1} = x_i + h \left(f\left(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2} f(t_i, x_i)\right) \right), i = 1, 2, \dots, n. \quad (6.15)$$

6.4.3 Метод Рунге-Кутты четвертого порядка

Наиболее известным является *метод Рунге-Кутты четвертого порядка*, расчетные формулы которого можно записать в виде:

$$\left\{ \begin{array}{l} x_{i+1} = x_i + \Delta x_i, i = 1, 2, \dots, n, \\ \Delta x_i = \frac{h}{6} (K_1^i + 2K_2^i + 2K_3^i + K_4^i), \\ K_1^i = f(t_i, x_i), \\ K_2^i = f(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2} K_1^i), \\ K_3^i = f(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2} K_2^i), \\ K_4^i = f(t_i + h, x_i + h K_3^i). \end{array} \right. \quad (6.16)$$

Одной из главных проблем при использовании рассмотренных ранее численных методов решения дифференциальных уравнений является, правильный выбор шага h . Для решения этой проблемы на каждом этапе применяют двойной пересчет. А именно: исходя из текущего верного значения $y(x_i)$, вычисляют величину $y(x_i + 2h)$ двумя способами: один раз с шагом h , а второй раз с двойным шагом $H = 2h$. Если расхождение полученных значений не превышает допустимой погрешности ε , то шаг h для данного этапа выбран правильно и полученное с его помощью значение можно принять за $y(x_i + 2h)$. В противном случае шаг уменьшают в два раза.

В рассматриваемом ниже методе Кутты–Мерсона проблема выбора шага интегрирования решена.

6.4.4 Метод Кутты-Мерсона четвертого порядка

Одной из модификаций метода Рунге-Кутты является метод Кутты-Мерсона (или пятиэтапный метод Рунге-Кутты четвертого порядка), который состоит в следующем [2]:

1. На i -м шаге рассчитываются коэффициенты:

$$\begin{aligned}
K_1^i &= f(t_i, x_i), \\
K_2^i &= f\left(t_i + \frac{h}{3}, x_i + \frac{h}{3} K_1^i\right) \\
K_3^i &= f\left(t_i + \frac{h}{3}, x_i + \frac{h}{6} K_1^i + \frac{h}{6} K_2^i\right), \\
K_4^i &= f\left(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{8} K_1^i + \frac{3h}{12} K_2^i\right), \\
K_5^i &= f\left(t_i + h, x_i + \frac{h}{2} K_1^i - \frac{3h}{2} K_3^i + 2h K_4^i\right).
\end{aligned} \tag{6.17}$$

2. Вычисляем приближенное значение $x(t_{i+1})$ по формуле:

$$\bar{x}_{i+1} = x_i + \frac{h}{2}(K_1^i - 3K_3^i + 4K_4^i). \tag{6.18}$$

3. Вычисляем приближенное значение $x(t_{i+1})$ по формуле:

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{6}(K_1^i - 4K_3^i + 4K_5^i). \tag{6.19}$$

4. Вычисляем оценочный коэффициент по формуле:

$$R = 0.2 \left| x_{i+1} - \bar{x}_{i+1} \right| \tag{6.20}$$

5. Сравниваем R с точностью вычислений ε . Если $R \geq \varepsilon$, то уменьшаем шаг вдвое и возвращаемся к п.1. Если $R < \varepsilon$, то значение, вычисленное по формуле (6.19), и будет вычисленным значением $x(t_{i+1})$ (с точностью ε).

6. Перед переходом к вычислению следующего значения x сравниваем R с $\frac{\varepsilon}{64}$. Если $R \leq \frac{\varepsilon}{64}$, то дальнейшие вычисления можно проводить с удвоенным шагом $h=2h$.

При решении уравнения методом Кутта-Мерсона невозможно гарантировать вычисление значения в заданных точках интервала $[t_0, t_n]$, так как шаг то увеличивается, то уменьшается. Однако после получения решения методом Кутта-Мерсона значение в любой точке интервала $[t_0, t_n]$ можно вычислить, интерполируя полученную зависимость $[t_i, t_i]$

Рассмотренные методы Рунге-Кутта относятся к классу одношаговых методов, в которых для вычисления значения в очередной точке x_{k+1} нужно знать значение в предыдущей точке x_k .

Еще один класс методов решения задачи Коши — многошаговые методы, в которых используются точки $x_{k-3}, x_{k-2}, x_{k-1}, x_k$ для вычисления x_{k+1} . В многошаговых методах первые четыре начальные точки $(t_0, x_0), (t_1, x_1), (t_2, x_2), (t_3, x_3)$ должны быть получены заранее любым из одношаговых методов (метод Эйлера, Рунге–Кутта и т.д.). Наиболее известными многошаговыми методами являются методы прогноза-коррекции Адамса и Милна.

6.5 Решение дифференциальных уравнений методом прогноза-коррекции Адамса

Рассмотрим решение уравнения (6.1)–(6.2) на интервале $[t_i; t_{i+1}]$. Будем считать, что решение в точках $t_0, t_1, t_2, \dots, t_i$ уже найдено, и значения в этих точках будем использовать для нахождения значения $x(t_{i+1})$.

Проинтегрируем уравнение (7.1) на интервале $[t_i; t_{i+1}]$ и получим соотношение [2]:

$$x(t_{i+1}) = x(t_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} f(t, x(t)) dt. \quad (6.21)$$

При вычислении интеграла, входящего в (6.23), вместо функции $f(t, x(t))$ будем использовать интерполяционный полином Лагранжа, построенный по точкам $(t_{i-3}, x_{i-3}), (t_{i-2}, x_{i-2}), (t_{i-1}, x_{i-1}), (t_i, x_i)$. Подставив полином Лагранжа в (6.23), получаем первое приближение (прогноз) \bar{x}_{i+1} для значения функции в точке t_{i+1} :

$$\bar{x}_{i+1} = x_i + \frac{h}{24} (-9f(t_{i-3}, x_{i-3}) + 37f(t_{i-2}, x_{i-2}) - 59f(t_{i-1}, x_{i-1}) + 55f(t_i, x_i)). \quad (6.22)$$

Как только \bar{x}_{i+1} вычислено, его можно использовать. Следующий полином и Лагранжа для функции $f(t, x(t))$ построим по точкам $(t_{i-2}, x_{i-2}), (t_{i-1}, x_{i-1}), (t_i, x_i)$ и новой точке (t_{i+1}, \bar{x}_{i+1}) после чего подставляем его в (6.23) и получаем второе приближение (корректор):

$$x_{i+1} = x_i + \frac{h}{24} (f(t_{i-2}, x_{i-2}) - 5f(t_{i-1}, x_{i-1}) + 19f(t_i, x_i) + 9f(t_{i+1}, \bar{x}_{i+1})). \quad (6.23)$$

Таким образом, для вычисления значения $x(t_{i+1})$ методом Адамса необходимо последовательно применять формулы (6.22), (6.23), а первые четыре точки f можно получить методом Рунге-Кутта.

6.6 Решение дифференциальных уравнений методом Милна

Отличие метода Милна от метода Адамса состоит в том, что в первом случае в качестве интерполяционного полинома используется полином Ньютона.

Подставив в (6.21) вместо функции $f(t, x(t))$ интерполяционный полином Ньютона, построенный по точкам

$$(t_{k-3}, x_{k-3}), (t_{k-2}, x_{k-2}), (t_{k-1}, x_{k-1}), (t_k, x_k),$$

получаем первое приближение — прогноз Милна \bar{x}_{k+1} для значения функции в точке t_{k+1} .

$$\bar{x}_{k+1} = x_{k-3} + \frac{4h}{3}(2f(t_{k-2}, x_{k-2}) - f(t_{k-1}, x_{k-1}) + 2f(t_k, x_k)). \quad (6.24)$$

Следующий полином Ньютона для функции $f(t, x(t))$ построим по точкам

$$(t_{k-2}, x_{k-2}), (t_{k-1}, x_{k-1}), (t_k, x_k)$$

и новой точке (t_{k+1}, \bar{x}_{k+1}) , после чего подставляем его в (6.21) и получаем второе приближение — корректор Милна:

$$x_{k+1} = x_{k-1} + \frac{h}{3}(f(t_{k-1}, x_{k-1}) + 4f(t_k, x_k) + f(t_{k+1}, \bar{x}_{k+1})) \quad (6.25)$$

В методе Милна для вычисления значения $x(t_{k+l})$ необходимо последовательно применять формулы (6.24) – (6.25), а первые четыре точки можно получить методом Рунге-Кутты.

Существует модифицированный метод Милна. В нем сначала вычисляется первое приближение по формуле (6.24), затем вычисляется управляющий параметр:

$$m_{k+1} = \bar{x}_{k+1} + \frac{28}{29}(x_k - \bar{x}_k), \quad (6.26)$$

после чего вычисляется значение второго приближения – корректор Милна по формуле:

$$x_{k+1} = x_{k-1} + \frac{h}{3}(f(t_{k-1}, x_{k-1}) + 4f(t_k, x_k) + f(t_{k+1}, m_{k+1})). \quad (6.27)$$

В модифицированном методе Милна первые четыре точки можно получить методом Рунге–Кутты, а для вычисления значения $x(t_{k+1})$ необходимо последовательно применять формулы (6.24), (6.26), (6.27).

Для вышеизложенного можно сделать вывод, что наиболее точным методами является метод Кутта-Мерсона, метод Адамса и модифицированный метод Милна.

7 МЕТОД СЕТОК ДЛЯ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ В ЧАСТНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Математические модели физических и иных процессов описываются с помощью дифференциальных уравнений в частных производных. Аргументами функций этих уравнений являются пространственные координаты x, y, z и время t . Один из основных аналитических методов решения уравнений математической физики — метод разделения переменных.

7.1 Общие сведения о дифференциальных уравнениях в частных производных

Линейным уравнением в частных производных второго порядка называется соотношение между функцией $u(x, y)$ (или (x, t)) и ее частными производными вида [1-4]:

$$L(u) = A(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial y} + C(x, y) \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + D(x, y) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, y) \frac{\partial u}{\partial y} + G(x, y)u = F(x, y) \quad (7.1)$$

Если переменная функция u зависит от x и t , то уравнение (7.1) может быть записано следующим образом:

$$L(u) = A(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + 2B(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial x \partial t} + C(x, t) \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + D(x, t) \frac{\partial u}{\partial x} + E(x, t) \frac{\partial u}{\partial t} + G(x, t)u = F(x, t) \quad (7.2)$$

В случае если $F=0$, то уравнения (7.1)-(7.2) называются однородными, иначе-неоднородными [1, 2, 3, 4].

Если $2B-AC < 0$, то уравнение (7.2) относится к классу эллиптических уравнений, если $2B-AC > 0$, то (7.2) — это гиперболическое уравнение; если $2B-AC = 0$ -параболическое уравнение. Когда $2B-AC$ не имеет постоянного знака, получается уравнение смешанного типа. С помощью преобразования переменных x, y (или x, t) уравнение можно привести к виду, когда $B = 0$ [3, 4]. В этом случае очень просто определяется тип уравнения. Если A и C имеют один и тот же знак, то (7.2) — эллиптическое уравнение, если разные, то гиперболическое, а если A или C равно 0, то уравнение относится к параболическим [2-4].

К классическим эллиптическим уравнениям относятся [2-4]:

- уравнение Лапласа $\Delta u = 0$, которое используется для описания магнитных и стационарных тепловых полей (в двумерном случае оператор Лапласа имеет вид $\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}$, в трехмерном –

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2});$$

- уравнение Пуассона, $\Delta u = f$ которое применяется в электростатике, теории упругости и других науках;

- уравнение Гельмгольца $\Delta u + cu = f$, описывающее установившиеся колебательные процессы.

Среди гиперболических уравнений можно выделить [2-4]:

- волновые уравнения: одномерное $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t)$ которое описывает, вынужденные колебания струны; двумерное

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = a^2 \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right) + f(x, y, t),$$

которое описывает колебания мембраны (при $f = 0$ уравнение описывает свободные колебания струны или мембраны);

- телеграфное уравнение $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + \frac{RC + LG}{LC} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{RG}{LC} u - \frac{1}{LC} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0$, которое описывает изменение потенциала и в линиях электропередачи. Здесь L, C, R, G- коэффициент самоиндукции, емкость, сопротивление, характеристика потерь на единицу длины линии.

К классическим параболическим уравнениям относится уравнение теплопроводности $\frac{\partial u}{\partial t} = a^2 \Delta u + f$.

Для нахождения единственного решения дифференциального уравнения в частных производных необходимо задать начальные и граничные условия. Начальными условиями принято называть условия, заданные в начальный момент времени t . Граничные условия задаются при различных значениях пространственных переменных. Для эллиптических уравнений задаются только граничные условия, которые можно разделить на три класса:

- условие Дирихле $u|_{(x,y,z) \in \Gamma} = \varphi(t)$. В этом случае на границе области Γ , в которой ищется решение, задана некая непрерывная

функция φ . В одномерном случае это условие принимает вид $u(0,t) = \varphi_1(t); u(L,t) = \varphi_2(t)$,

где $(0, L)$ - интервал, на котором ищется решение одномерной задачи;

2. условие Неймана $\frac{\partial u}{\partial n} \Big|_{(x,y,z) \in \Gamma} = \varphi(t)$. В этом случае на границе области заданна производная по направлению n внешней нормали;

3. смешанное условие $\left(\alpha u + \beta \frac{\partial u}{\partial n} \right) \Big|_{(x,y,z) \in \Gamma} = \varphi(t)$.

Для параболических уравнений, кроме граничных условий, необходимо определить одно начальное, которое может быть таким: $u(x, t_0) = \psi(x)$

В случае гиперболических уравнений начальные условия могут быть следующими: $u(x, t_0) = \psi_1(x)$ и $\frac{\partial u(x, t_0)}{\partial t} = \psi_2(x)$. Решение ряда дифференциальных уравнений в частных производных может быть получено аналитически. Одним из наиболее часто используемых методов является метод разделения переменных (метод Фурье). Поэтому широкое распространение получили численные методы решения уравнений в частных производных.

7.2 Использование метода сеток для решения уравнениях в частных производных

Одним из наиболее распространенных численных методов решения уравнений является метод сеток. В методе сеток область Q , в которой необходимо найти решение уравнения, прямыми, параллельными осям $t = t_j$ и $x = x_i$, разобьем на прямоугольные области (см. рис. 7.1), где $x_i = x_0 + ih$, $h = \frac{x_n - x_0}{n}$, $i=0,1,2,\dots,n$, $t_j = t_0 + j\Delta$, $\Delta = \frac{t_k - t_0}{k}$, $j = 0,1,\dots,k$. Точки, которые лежат на границе Γ области Ω , называются внешними, остальные точки — внутренними. Совокупность всех точек называется сеткой Ω_h^Δ величины h и Δ - шагами сетки по x и t соответственно. Идея метода сеток состоит в том, что вместо любой непрерывной функции $w(x,t)$ будем рассматривать дискретную функцию $w_i^j = w(x_i, t_j)$, которая определена в узлах сетки Ω_h^Δ . Вместо производных функции будем рассматривать их простейшие разностные ап-

проксимации в узлах сетки. Таким образом, вместо системы дифференциальных уравнений в частных производных получим систему алгебраических уравнений. Чем меньше величины h и Δ , тем точнее получаемые алгебраические уравнения моделируют исходное дифференциальное уравнение в частных производных.

Метод сеток в литературе также называют методом конечных разностей.

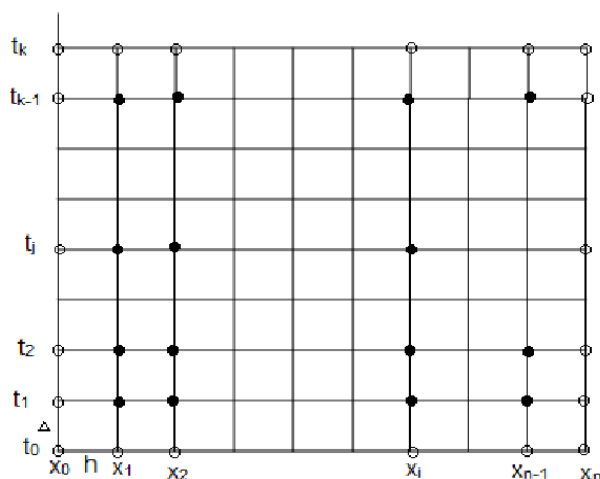


Рис. 7.1 Сетка Ω_h^Δ для области Ω с границей Γ

8 РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ДИФФУЗИИ

Знакомство с численными методами решения дифференциальных уравнений в частных производных начнем с разностных схем решения параболических уравнений [2]. Разностные схемы решения параболических уравнений будем рассматривать на примере следующего одномерного уравнения:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), 0 \leq x \leq L, 0 \leq t \leq T, \\ u(0, t) &= \mu(t), u(L, t) = \eta, 0 \leq t \leq T \\ u(x, 0) &= \varphi(x), 0 \leq x \leq L.\end{aligned}\tag{8.1}$$

$$a^2 = \frac{\lambda}{c\rho}$$

где a^2 – коэффициент температуропроводности, λ – коэффициент температуропроводности материала стержня, c – удельная теплоемкость, ρ – плотность материала.

Построим сетку Ω_h^Δ (см. рис. 7.1). Для получения сеточного уравнения заменим производную $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ приближенной разностной формулой [2]:

$$\frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial x^2} = \frac{u_{i,j} - 2u_{i,j} + 2u_{i-1,j}}{h^2}\tag{8.2}$$

Для замены $\frac{\partial u}{\partial t}$ можно воспользоваться одной из приближенных разностных формул:

$$\frac{\partial u(x_i, t_j)}{\partial t} = \frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta},\tag{8.3}$$

$$\frac{\partial u(x_i, t_j)}{\partial t} = \frac{u_{i,j} - u_{i,j-1}}{\Delta}\tag{8.4}$$

Кроме того, заменим начальные и граничные условия их разностной аппроксимацией:

$$u_{i,0} = \varphi(x_i) = \varphi_i, i = 0, 1, \dots, n,\tag{8.5}$$

$$\begin{aligned}u_{0,j} &= \mu(t_j) = \mu_i, u_{n,j} = \eta(t_j) = \eta_j, \\ j &= 0, 1, \dots, k.\end{aligned}\tag{8.6}$$

8.1 Явная двухслойная разностная схема

Заменяя частные производные в задаче (8.1) соотношениями (8.2) и (8.3) и учитывая условия (8.5)–(8.6), получим следующую вычислительную схему для расчета значений функции u в узлах сетки Ω_h^Δ :

$$u_{i,j+1} = \mu_{i-1,j} + (1-2\gamma)u_{i,j} + \mu_{i+1,j} + \Delta \cdot f_{i,j}, \quad (8.7)$$

$$u_{0,j} = \mu_j, u_{n,j} = \eta_j, u_{i,0} = \varphi_i, \gamma = \frac{a^2 \Delta}{h^2} \quad (8.8)$$

Это явная двухслойная разностная схема (рис. 8.1). Учитывая, что на нулевом слое (при $i = 0$) все значения $u_{0,i}$ (как, впрочем, и $u_{0,j}$, $u_{n,i}$) известны, по формуле (8.7) можно сначала явно рассчитать значения $u_{i,1}$, затем $u_{i,2}$ и так до $u_{i,k}$. Для устойчивости разностной схемы (8.7) значения шагов по t и x должны удовлетворять следующему условию:

$$\Delta \leq \frac{h^2}{2a^2} \quad (8.9)$$

Блок–схема решения уравнения (8.1) с помощью явной разностной схемы (8.7)–(8.8) представлена на рис. 8.3.

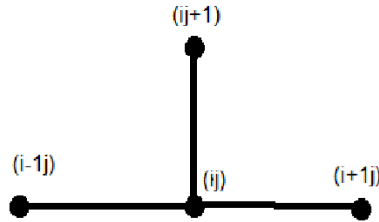


Рис 8.1 Шаблон явной двухслойной разностной схемы

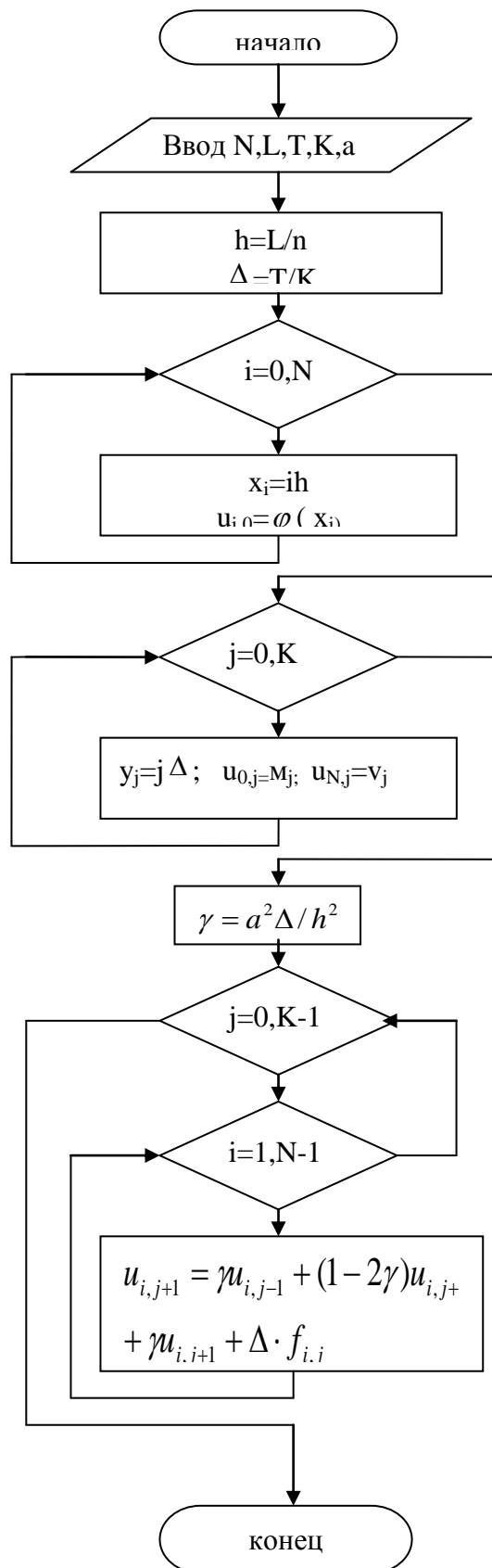


Рис 8.2 Блок–схема решения параболического уравнения с помощью явной разностной схемы

8.2 Неявная разностная схема

При решении параболических уравнений с помощью явной разностной схемы основной проблемой является устойчивость решения и правильный выбор шага по t , удовлетворяющего соотношению (8.9). Для решения этой проблемы были предложены неявные разностные схемы. Эти схемы абсолютно устойчивы, но алгоритм решения получаемого сеточного уравнения несколько сложнее, чем простой пересчет по формуле (8.7). Для построения неявной разностной схемы заменим частные производные в задаче (8.1) соотношениями (8.2), (8.4) вместо (8.3) для явной схемы) и с учётом условий (8.5)–(8.6) получим следующую вычислительную схему для расчёта значений функции u в узлах сетки Ω_h^Δ :

$$\begin{aligned} Yu_{i-1,j} + (1 + 2Y)u_{i,j} + u_{i+1,j} &= -u_{i-1,j} - \Delta \cdot f_{i,j}, \\ i &= 1, 2, \dots, n-1, \quad j = 1, 2, \dots, k, \end{aligned} \quad (8.10)$$

Соотношения (8.10) в месте с равенствами (8.7) – неявная двухслойная разностная схема (рис. 8.4).

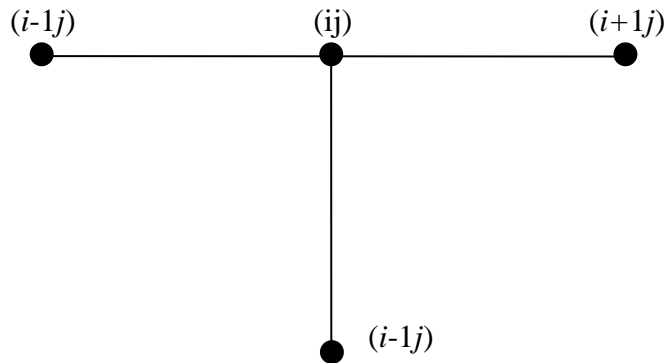


Рис 8.4 Шаблон неявной двухслойной разностной схемы

Схема (8.8), (8.10) не позволяет явно выписывать решение, для нахождения $u_{i,j}$ при каждом значении j необходимо решить трёхдиагональную систему линейных алгебраических уравнений, для чего можно использовать одним из итерационных методов или методом прогонки (см. главу 2). преобразуем систему (8.10) к следующему виду:

$$u_{i,j} = \frac{\gamma}{1+2\gamma} (u_{i-1,j} + u_{i+1,j}) + \frac{u_{i,j-1}}{1+2\gamma} + \frac{\Delta}{1+2\gamma} f(x_i, t_j). \quad (8.11)$$

Формула (8.11) позволит запрограммировать решение системы, получаемой с помощью неявной разностной схемы методом Зейделя.

8.3 Шеститочечная параметрическая схема

Сеточный шаблон показан на рис. 8.6:

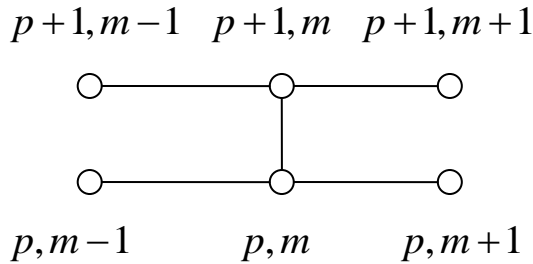


Рис. 8.6 Сеточный шаблон шеститочечной параметрической схемы

Разностная схема:

$$\begin{aligned} \frac{u_m^{p+1} - u_m^p}{\tau} - \frac{a^2}{h^2} [\sigma(u_{m-1}^{p+1} - 2u_m^{p+1} + u_{m+1}^{p+1}) + \\ + (1 - \sigma)(u_{m-1}^p - 2u_m^p + u_{m+1}^p)] = f_m^{p+1/2}, \\ p = 0, 1, \dots, P-1; \quad m = 0, 1, \dots, M-1; \\ u_m^0 = \varphi_m, \quad m = 0, 1, \dots, M; \\ u_0^p = \alpha_1^p, \quad p = 0, 1, \dots, P; \\ u_M^p = \alpha_2^p, \quad p = 0, 1, \dots, P. \end{aligned}$$

где $0 \leq \sigma \leq 1$ — параметр схемы;

$\sigma = 0$ — явная четырехточечная схема;

$\sigma = 1$ — неявная четырехточечная схема;

$\sigma = 1/2$ — схема Кранка-Николсона.

Метод решения полученной системы линейных уравнений с матрицей трехдиагональной структуры — прогонка.

Порядок аппроксимации:

$$\begin{aligned} \sigma = 1/2: & \quad O(\tau^2 + h^2), \\ \sigma = 1/2: & \quad O(\tau + h^2), \\ \sigma = 1/6: & \quad O(\tau + h^4). \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$K = a^2 r, \quad r = \frac{\tau}{h^2}.$$

Схема устойчива при любых K , если $0 \leq \sigma < 1/2$; схема устойчива, если

$$\tau < \frac{h^2}{2a^2(1-2\sigma)}.$$

8.4 Схема Франкела-Дюфорта

Сеточный шаблон показан на рис. 8.7:

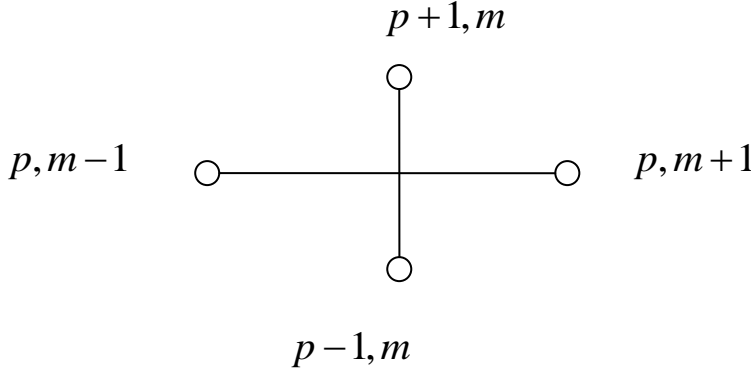


Рис. 8.7 Сеточный шаблон

Разностная схема:

$$\frac{u_m^{p+1} - u_m^{p-1}}{2\tau} - a^2 \frac{u_{m-1}^p - [u_m^{p+1} + u_m^{p-1}] + u_{m+1}^p}{h^2} = f_m^p,$$

$$p = 0, 1, \dots, P-1; \quad m = 1, 2, \dots, M-1;$$

$$u_m^0 = \varphi_m, \quad m = 0, 1, \dots, M;$$

$$u_0^p = \alpha_1^p, \quad p = 1, 2, \dots, P;$$

$$u_M^p = \alpha_2^p, \quad p = 1, 2, \dots, P.$$

Значения функции на втором слое по времени рассчитываются по явной центральной четырехточечной схеме. Значение сеточной функции на верхнем временном слое $p+1$ рассчитывается по ее значениям на двух предыдущих нижних слоях: p и $p-1$.

Порядок аппроксимации: $O(\tau^2 + h^2 + \tau^2/h^2)$.

Схема устойчива при любых $K = a^2 r$, $r = \tau/h^2$.

8.5 Схема Ричардсона

Сеточный шаблон показан на рис. 8.8:

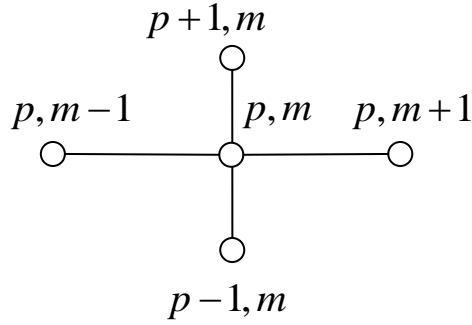


Рис. 8.8 Сеточный шаблон

Разностная схема:

$$\frac{u_m^{p+1} - u_m^{p-1}}{2\tau} - a^2 \frac{u_{m-1}^p - 2u_m^p + u_{m+1}^p}{h^2} = f_m^p,$$

$$p = 0, 1, \dots, P-1; \quad m = 1, 2, \dots, M-1;$$

$$u_m^0 = \varphi_m, \quad m = 0, 1, \dots, M;$$

$$u_0^p = \alpha_1^p, \quad p = 1, 2, \dots, P;$$

$$u_M^p = \alpha_2^p, \quad p = 1, 2, \dots, P.$$

Значения функции на втором слое по времени рассчитываются по явной центральной четырехточечной схеме. Значение сеточной функции на верхнем временном слое $p+1$ рассчитывается по ее значениям на двух предыдущих нижних слоях: p и $p-1$.

Порядок аппроксимации: $O(\tau^2 + h^2)$

Схема неустойчива при любых K .

8.6 Схема Алена-Чена

Сеточный шаблон показан на рис. 8.9:

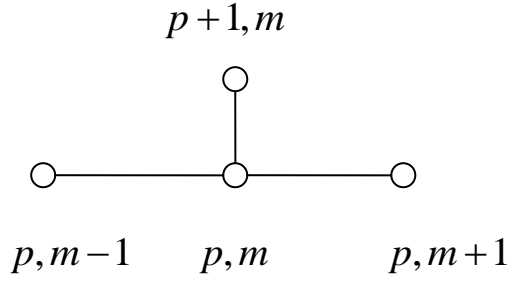


Рис. 8.9 Сеточный шаблон

Разностная схема:

$$\frac{u_m^{p+1} - u_m^p}{\tau} - a^2 \frac{u_{m-1}^p - 2u_m^{p+1} + u_{m+1}^p}{h^2} = f_m^p,$$

$$p = 0, 1, \dots, P-1; \quad m = 1, 2, \dots, M-1;$$

$$u_m^0 = \varphi_m, \quad m = 0, 1, \dots, M;$$

$$u_0^p = \alpha_1^p, \quad p = 1, 2, \dots, P;$$

$$u_M^p = \alpha_2^p, \quad p = 1, 2, \dots, P.$$

Значения сеточной функции на верхнем временном слое находятся по ее значениям на нижнем слое, поскольку разностное уравнение разрешается относительно u_m^{p+1} .

Порядок аппроксимации: $O(\tau + h^2 + \tau / h^2)$.

Схема устойчива при любых K .

8.7 Нецентральная явная схема

Сеточный шаблон показан на рис. 8.10:

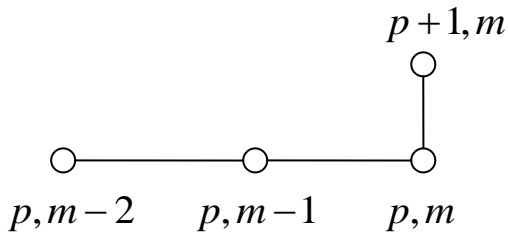


Рис. 8.10 Сеточный шаблон

Разностная схема:

$$\frac{u_m^{p+1} - u_m^p}{\tau} - a^2 \frac{u_{m-2}^p - 2u_{m-1}^p + u_m^p}{h^2} = f_m^p,$$

$$p = 0, 1, \dots, P-1; \quad m = 2, 3, \dots, M-1;$$

$$u_m^0 = \varphi_m, \quad m = 0, 1, \dots, M;$$

$$u_0^p = \alpha_1^p, \quad p = 1, 2, \dots, P;$$

$$u_M^p = \alpha_2^p, \quad p = 1, 2, \dots, P.$$

Значение сеточной функции на верхнем временном слое $p+1$ рассчитывается по ее значениям на нижнем слое p (значения сеточной функции в точках $\{m=1; p=1, 2, \dots, P\}$ рассчитываются по шеститочечной параметрической схеме при $\sigma=1$).

Порядок аппроксимации: $O^{(\tau+h)}$.

Схема устойчива при любых K .

8.8 Схема Саульева

Сеточный шаблон показан на рис. 8.11:

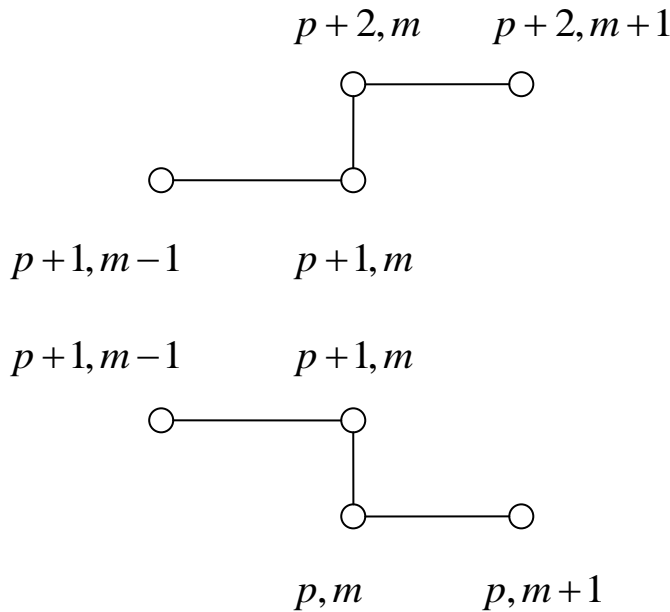


Рис. 8.11 Сеточный шаблон

Разностная схема:

$$\frac{u_m^{p+1} - u_m^p}{\tau} - a^2 \frac{u_{m-1}^{p+1} - [u_m^{p+1} + u_m^p] + u_{m+1}^p}{h^2} = f_m^{p+1/2},$$

$$\frac{u_m^{p+2} - u_m^{p+1}}{\tau} - a^2 \frac{u_{m-1}^{p+1} - [u_m^{p+2} + u_m^{p+1}] + u_{m+1}^{p+2}}{h^2} = f_m^{p+3/2},$$

$$p = 0, 1, \dots, P-1; \quad m = 1, 2, \dots, M-1;$$

начальные и граничные условия в такой схеме реализуют следующим образом:

$$\begin{aligned} u_m^0 &= \varphi_m, & m &= 0, 1, \dots, M; \\ u_0^p &= \alpha_1^p, & p &= 1, 2, \dots, P; \\ u_M^p &= \alpha_2^p, & p &= 1, 2, \dots, P. \end{aligned}$$

Алгоритм численного решения задачи — «бегущий счет»: слева направо — первый этап, справа налево — второй.

Порядок аппроксимации: $O(\tau^2 + h^2 + \tau^2 / h^2)$

Схема устойчива при любых K .

8.9 Точные решения тестовых краевых задач для одномерного линейного уравнения теплопроводности

В дальнейшем мы будем сравнивать численные решения с точными решениями следующих задач.

Задача 1:

$$\begin{aligned} u_t' &= u_{xx}', & 0 < t < T, \quad 0 < x < 1, \\ u(0, x) &= 0, & 0 < x < 1, \\ u(t, 0) &= 0, & 0 < t < T, \\ u(t, 1) &= 1, & 0 < t < T. \end{aligned}$$

Точное решение:

$$u(t, x) = x + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \cdot (\pi n)^{-1} \cdot e^{-n^2 \pi^2 t} \cdot \sin n \pi x.$$

Задача 2:

$$\begin{aligned} u_t' &= u_{xx}', & 0 < t < T, \quad 0 < x < 1, \\ u(0, x) &= \sin \pi x, & 0 < x < 1, \\ u(t, 0) &= 0, & 0 < t < T, \\ u(t, 1) &= 0, & 0 < t < T. \end{aligned}$$

Точное решение:

$$u(t, x) = e^{-\pi^2 t} \sin \pi x.$$

Задача 3:

$$\begin{aligned} u_t' &= u_{xx}' + \sin \pi x, & 0 < t < T, \quad 0 < x < 1, \\ u(0, x) &= 0, & 0 < x < 1, \\ u(t, 0) &= 0, & 0 < t < T, \\ u(t, 1) &= 0, & 0 < t < T. \end{aligned}$$

Точное решение:

$$u(t, x) = \frac{1}{\pi^2} \left[1 - e^{-\pi^2 t} \right] \sin \pi x.$$

9 РЕШЕНИЕ ДВУХМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

9.1. Использование метода сеток для решения одномерного волнового уравнения

Решение гиперболических уравнений также можно осуществить с помощью разностных схем. Разностные схемы решения одномерного гиперболического уравнения рассмотрим на примере следующего уравнения:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} &= a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + f(x, t), \\ u(x, 0) &= \varphi(x), \frac{\partial u(x, 0)}{\partial t} = \psi(x), 0 \leq x \leq L, \\ u(0, t) &= \mu(t), u(L, t) = v(t), 0 \leq t \leq T.\end{aligned}\tag{9.1}$$

Построим сетку Ω_k^Δ (см. рис. 8.1), в которой будем искать решение уравнения (9.1). Частную производную $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}$ заменим разностным соотношением (8.2), а производную $\frac{\partial^2 u}{\partial t^2}$ соотношением (9.2):

$$\frac{\partial^2 u(x_i, t_j)}{\partial t^2} = \frac{u_{i,j-1} - 2u_{i,j} + u_{i,j+1}}{\Delta^2}.\tag{9.2}$$

Подставляя (9.2), (8.2), (8.3) в гранично-начальную задачу (9.1), получим следующую явную разностную схему решения уравнения:

$$\begin{aligned}u_{i,j+1} &= -u_{i,j-1} + \gamma(u_{i-1,j} + u_{i+1,j}) + (2 - 2\gamma)u_{ij} + \Delta^2 f_{i,j}, \\ i &= 1, 2, \dots, N-1, j = 1, 2, \dots, K-1, \\ u_{i,0} &= \varphi(x_i), \frac{u_{i,1} - u_{i,0}}{\Delta} = \psi_i, u_{i,1} = u_{i,0} + \Delta \psi_i, i = 0, 1, \dots, N, \\ u_{0,j} &= \mu_j, u_{N,j} = v_j, j = 0, 1, \dots, K, \\ \gamma &= \frac{a^2 \Delta^2}{h^2}.\end{aligned}\tag{9.3}$$

которая устойчива при $\gamma \leq 1$ и по аналогии с разностной схемой (8.7)–(8.8) может быть легко запрограммирована. Блок-схема этой разност-

ной схемы аналогична изображенной на рис. 8.3 и отличается только формулой расчета $u_{i,j+1}$ (см. формулу (9.3)).

Для решения гиперболических уравнений можно построить и неявные схемы, однако в связи с тем, что у них нет таких преимуществ перед явными [2], как в параболических уравнениях, имеет смысл использовать их, только когда нельзя построить явную (например, при смешанных условиях на границе области).

9.2. Использование метода сеток для решения одномерного уравнения Пуассона

Рассмотрим разностную схему для эллиптического уравнения в прямоугольной области $\Omega(R-a \leq x \leq R+a; -a \leq y \leq a)$ с граничными условиями Дирихле на границе Γ :

$$\Delta u = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} - \frac{5}{x} \frac{\partial \psi}{\partial x} = -2, \quad (9.4)$$

$$\psi(x, y)|_{(x,y) \in \tilde{A}} = 0.$$

Построим сетку Ω_{hx}^{hy} , для чего проведем в области прямые, параллельные осям $y = y_j$ и $x = x_i$, где $x_i = R - b + i \cdot hx$, $hx = \frac{2b}{n}$,

$$i = 0, 1, 2, \dots, n, \quad y_j = -a + j \cdot hy, \quad hy = \frac{2a}{k}, \quad j = 0, 1, \dots, k.$$

Для построения разностного уравнения заменим частные производные и граничные условия следующими соотношениями:

$$\frac{\partial^2 \psi(x_i, y_j)}{\partial x^2} = \frac{\psi_{i+1,j} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i-1,j}}{hx^2}, \quad (9.5)$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x_i, y_j)}{\partial y^2} = \frac{\psi_{i,j+1} - 2\psi_{i,j} + \psi_{i,j-1}}{hy^2}.$$

$$\psi_{i,0} = \psi_{i,Ny} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, Nx,$$

$$\psi_{0,j} = \psi_{Nx,j} = 0, \quad j = 0, 1, \dots, Ny. \quad (9.6)$$

С помощью соотношений (9.5)–(9.6) преобразуем эллиптическую краевую задачу к следующей системе разностных уравнений:

$$\psi_{i,j} = \frac{1}{A}(B_i\psi_{i+1,j} + C_i\psi_{i-1,j} + D(\psi_{i,j-1} + \psi_{i,j+1}) + 2),$$

$$A = \left(\frac{2}{hx^2} + \frac{2}{hy^2} \right), B_i = \frac{1}{hx^2} + \frac{5}{2 \cdot hx \cdot x_i}, C_i = \frac{1}{hx^2} - \frac{5}{2 \cdot hx \cdot x_i}, D = \frac{1}{hy^2},$$

$$i = 1, 2, \dots, Nx-1; \quad j = 1, 2, \dots, Ny-1,$$

$$\psi_{i,0} = \psi_{i,Ny} = 0, \quad i = 0, 1, \dots, Nx,$$

$$\psi_{0,j} = \psi_{Nx,j} = 0, \quad j = 0, 1, \dots, Ny.$$

Эту систему можно решить итерационным методом Зейделя.

Аналогично можно построить разностную схему для решений уравнения Лапласа и Пуассона.

В случае медленной сходимости итерационных процессов при решении сеточных уравнений, получаемых путём аппроксимации гиперболических и эллиптических задач, имеет смысл попробовать заменить метод Зейделя градиентными методами (или методами релаксации) [2].

ЛИТЕРАТУРА

1. Демидович, Б.П. Численные методы анализа / Б.П. Демидович, И.А. Марон, В.З. Шувалова. – М.: Наука, 1967. – 368 с.
2. Вержбицкий, В.М. Основы численных методов / В.М. Вержбицкий. – М.: Высшая школа, 2002. – 840 с.
3. Будак, Б.М. Сборник задач по математической физике / Б.М. Будак, А.А. Самарский, А.Н. Тихонов. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2003. – 688 с.
4. Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский. – М.: Наука, 1966. – 724 с.
5. Алексеев, Е.Р. Решение задач вычислительной математики в пакетах Mathcad 12, Matlab 7, Maple 9 / Е.Р. Алексеев, О.В. Чеснокова. – М.: НТ Пресс, 2006. – 496 с. ил.
6. Зенкевич, О. Конечные элементы и аппроксимация / О. Зенкевич, К. Морган. М.: Мир, 1986. 318 с.