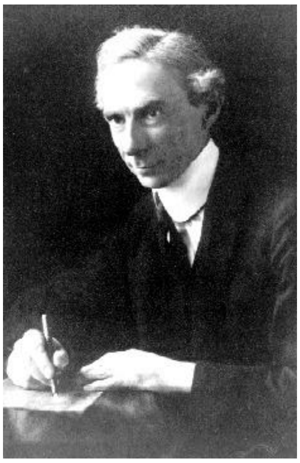
Обчислювальні методи в сучасних наукових дослідженнях

Модуль №1 «Обчислювальні методи в алгебрі та аналізі»

Тема 2.1.1. Елементи теорії похибок. Методи розв'язування рівнянь з однією змінною.

Місце обчислювальної математики в системі наук

Обчислювальна математика – це розділ математики, що поєднує її фундаментальні розділи з прикладними. При застосуванні математики в природничих, технічних та суспільних науках спершу створюються формалізовані моделі відповідних явищ чи об'єктів, а потім ці моделі аналізуються і проводиться наближений підрахунок розв'язків отриманих математичних задач. Саме за цей підрахунок і відповідає обчислювальна математика. Ця обставина визначає особливу роль обчислювальної математики в сучасній науці. Британський філософ і математик, лауреат нобелівської премії з літератури 1950 року Бертран Рассел говорив: «Кожна точна наука грунтується на приблизності».



Бертра́н А́ртур Ві́льям Расселл (Bertrand Arthur William Russell, 1872 — 1970)

Таким чином, обчислювальна математика — розділ математики, що включає коло питань, зв'язаних з виконанням наближених обчислень. У більш вузькому розумінні, обчислювальна математика — теорія чисельних методів розв'язування типових математичних задач.

В нинішньому переліку спеціальностей обчислювальна математика має шифр 01.01.07.

Але на обчислювальну математику претендують також кібернетики. У них є спеціальність 01.05.02 «Математичне моделювання та обчислювальні методи». Це пов'язано з тим, що у сучасної обчислювальної математики є також аспекти, що виникають в зв’язку з реалізацією її методів та алгоритмів з використанням обчислювальної техніки.

Отже, задачі природознавства, технічних і суспільних наук спочатку описуються за допомогою певних математичних моделей. Потім за допомогою методів теорії функцій, функціонального аналізу, диференціальних рівнянь і інших розділів фундаментальної математики будуються алгоритми наближеного розв’язування цих задач. І потім на базі цих алгоритмів пишуться програми для найрізноманітніших універсальних і спеціалізованих обчислювальних пристроїв. Таким чином, методи і результати сучасної математики входять в повсякденне життя кожної людини, навіть тих людей, що вважають математику і взагалі науку невартими заняттями.

Прикладні задачі, які приводять до задач обчислювальної математики, формулюються як правило так:

1) Потрібно, знаючи модель пристрою і вхідні сигнали, вирахувати вихідні (пряма задача);
2) Потрібно, знаючи модель пристрою і вихідні сигнали, вирахувати вхідні (обернена задача);
3) Потрібно за певними наборами вхідних та вихідних сигналів побудувати наближену модель пристрою (задача ідентифікації).
В математичній нотації це можна записати так:

$$Ax = y,$$

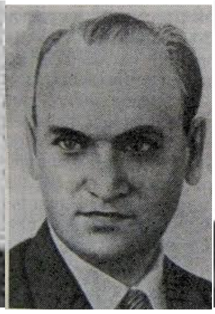
де $x \in \mathcal{X}$, $y \in \mathcal{Y}$, $A: \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$.
В залежності від того, в яких просторах і які оператори розглядаються, до задач обчислювальної математики належать:

- розв'язування систем лінійних рівнянь
- пошук власних значень і векторів матриці
- пошук сингулярних значень і векторів матриці
- розв'язування нелінійних (в тому числі алгебраїчних та трансцендентних) рівнянь
- розв'язування систем нелінійних алгебраїчних рівнянь
- розв'язування диференціальних рівнянь (як звичайних диференціальних рівнянь, так і рівнянь з частинними похідними)
- розв'язування систем диференціальних рівнянь
- розв'язування інтегральних рівнянь
- задачі апроксимації
- задачі інтерполяції
- задачі екстраполяції
- задачі оптимізації
- задачі регресії
- обернені задачі.

Обчислювальна математика в Інституті математики НАН України

В 1998 році в Інституті математики НАН України створено відділ обчислювальної математики. Очолює відділ з часу його заснування академік НАН України Володимир Леонідович Макаров.

Але і до заснування відділу в Інституті виконувалися дослідження з обчислювальної математики. Зокрема, важливі результати у цій галузі були отримані Є.Я Ремезом, П.Ф.Фільчаковим, В.К.Дзядиком, М.П.Корнєйчуком та їх учнями.



Теорія похибок

Під похибкою будемо розуміти величину, що характеризує точність результату. Похибки, що виникають при розв'язуванні задачі, можна поділити на три групи:

1) неусувна похибка
2) похибка методу
3) похибка обчислень

Неусувна похибка може бути наслідком:

а) неточності вхідних даних, що входять до математичного описання задачі,

б) невідповідності математичної моделі реальній задачі (інколи цю похибку називають похибкою математичної моделі).

Похибка методу пояснюється тим, що для розв'язування математичної задачі доводиться використовувати наближені методи, оскільки отримання точного розв'язку необмеженої або неприйнятно великої кількості арифметичних операцій, а в багатьох випадках і просто неможливо.

Похибка обчислень виникає при вводі-виводі даних до комп'ютера та при виконанні математичних операцій.

Основна задача теорії похибок – знаходження області невизначеності результату.

Абсолютна та відносна похибки

Нехай x – точне значення деякої величини, а x^* – її відоме наближене значення.

Абсолютною похибкою *числа* x^* *називається деяка величина* Δx^*, *що задовольняє умові*

$$\left| x^* - x \right| \le \Delta(x^*)\,. \qquad (1)$$

Відносною похибкою *числа* x^* *називається деяка величина* δx^*, *що задовольняє умові*

$$\left| \frac{x^* - x}{x^*} \right| \le \delta(x^*)\,. \qquad (2)$$

Відзначимо, що точність результату краще характеризує відносна похибка. Інформацію про абсолютну та відносну похибки можна використати для наступного представлення числа x:

$$x = x^* \pm \Delta(x^*),$$

$$x = x(1 \pm \delta(x^*)).$$

Пряма задача теорії похибок

В деякій області G n-вимірного простору розглядається неперервно-диференційована функція $y=f(x_1, x_2,\ldots, x_n)$. Припустимо, що потрібно обчислити значення цієї функції в точці $(x_1, x_2,\ldots, x_n)\in G$, а відомі тільки наближені значення $x_1^*, x_2^*,\ldots, x_n^*$ такі, що точка $(x_1^*, x_2^*,\ldots, x_n^*) \in G$, та їх похибки.

обчислимо наближене значення $y^* = f(x_1^*, x_2^*,\ldots, x_n^*)$ та оцінимо його абсолютну похибку.

Використовуючи формулу Лагранжа, будемо мати

$$\Delta(y^*) = \left| f(x_1^*, x_2^*,\ldots, x_n^*) - f(x_1, x_2,\ldots, x_n) \right| \le \sum_{j=1}^{n} B_j \Delta(x_j^*)\,, \qquad (3)$$

де

$$B_j = \sup_G \left| \frac{\partial f(x_1, x_2,\ldots, x_n)}{\partial x_j} \right|.$$

При практичних розрахунках окрім оцінки (3) використовують оцінку

$$\Delta(y^*) \le \sum_{j=1}^{n} \left| \frac{\partial f(x_1^*, x_2^*,\ldots, x_n^*)}{\partial x_j} \right| \Delta(x_j^*)\,, \qquad (4)$$

яку називають лінійною оцінкою похибки.

Виходячи з оцінки (4), знайдемо відносну похибку:

$$\delta(y^*) \le \sum_{j=1}^{n} \left| \frac{\dfrac{\partial f(x_1^*, x_2^*, ..., x_n^*)}{\partial x_j}}{f(x_1^*, x_2^*, ..., x_n^*)} \right| . \qquad (5)$$

Використовуючи формули (4), (5), визначимо похибки результатів математичних операцій.

1. **Похибка суми.**

$$y = f(x_1, x_2) = x_1 + x_2, \quad x_1, x_2 > 0 .$$

Оскільки $f'_{x_j}(x^*) = 1$, то з (4) будемо мати

$$\Delta(y^*) = \Delta(x_1^*) + \Delta(x_2^*) , \qquad (6)$$

а з (5) відповідно

$$\delta(y^*) = \left| \frac{x_1^*}{x_1^* + x_2^*} \right| \delta(x_1^*) + \left| \frac{x_2^*}{x_1^* + x_2^*} \right| \delta(x_2^*) . \qquad (7)$$

Аналогічно знаходимо похибки для інших математичних операцій.

2. **Похибка різниці.**

$$y = f(x_1, x_2) = x_1 - x_2, \quad x_1 > x_2 > 0 .$$

$$\Delta(y^*) = \Delta(x_1^*) + \Delta(x_2^*) , \qquad (8)$$

$$\delta(y^*) = \frac{x_1^* \delta(x_1^*) + x_2^* \delta(x_2^*)}{x_1^* - x_2^*} . \qquad (9)$$

3. **Похибка множення.**

$$y = f(x_1, x_2) = x_1 \cdot x_2, \quad x_1, x_2 > 0 .$$

$$\Delta(y^*) = |x_2^*| \Delta(x_1^*) + |x_1^*| \Delta(x_2^*), \qquad (10)$$

$$\delta(y^*) = \delta(x_1^*) + \delta(x_2^*) . \qquad (11)$$

4. **Похибка ділення.**

$$y = f(x_1, x_2) = x_1 / x_2, \quad x_1, x_2 > 0 .$$

$$\Delta(y^*) = \frac{|x_2^*| \Delta(x_1^*) + |x_1^*| \Delta(x_2^*)}{(x_2^*)^2} , \qquad (12)$$

$$\delta(y^*) = \delta(x_1^*) + \delta(x_2^*) . \qquad (13)$$

Відзначимо, що для суми та різниці абсолютні похибки додаються, а для операцій множення та ділення складаються відносні похибки. З формули (9) видно, що якщо віднімаються два близьких числа, то відносна похибка результату може значно зрости. А при діленні на досить мале число може значно зрости абсолютна похибка.

Обернена задача теорії похибок

Обернена задача теорії похибок полягає в наступному: з якою точністю потрібно задати значення аргументів $x_1^*, x_2^*, ..., x_n^*$ функція $f(x_1, x_2, ..., x_n)$, щоб похибка значення функції $f(x_1^*, x_2^*, ..., x_n^*)$ не перевищувала заданої величини ε.

Для функції однієї змінної *y*=*f*(*x*) абсолютну похибку можна наближено обчислити за формулою

$$\Delta(x^*) = \frac{\Delta(y^*)}{\left|f'(x^*)\right|}, \quad f'(x^*) \neq 0. \qquad (14)$$

Для функції декількох змінних $y = f(x_1, x_2, ..., x_n)$ задача розв'язується за допомогою наступних рекомендацій:

а) принцип рівних впливів, тобто вважаємо, що всі доданки $c_i = \left|\partial f / \partial x_i\right| \Delta(x_i^*), \quad i = \overline{1,n}$ рівні між собою. Тоді абсолютні похибки всіх аргументів визначаються формулою

$$\Delta(x_i^*) = \frac{\Delta(y^*)}{n\left|\dfrac{\partial f^*}{\partial x_i}\right|}, \quad i = \overline{1,n}; \qquad (15)$$

б) вважаємо всі похибки рівними, причому максимально можливими, тобто покладемо

$$\Delta(x_1^*) = \Delta(x_2^*) = ... = \Delta(x_n^*) = \delta,$$

де

$$\delta = \varepsilon / (c_1 + c_2 + ... + c_n).$$

Методи розв'язування рівнянь з однією змінною

Рівняння з однією змінною

$$f(x) = 0,$$

де функція f визначена і неперервна на проміжку $x \in [a, b]$. Якщо функція f – алгебраїчний многочлен, рівняння називають ***алгебраїчним***. Якщо функція f містить тригонометричні, логарифмічні, показникові та інші, відмінні від многочленів, функції, рівняння називають ***трансцендентним***. Розв'язки рівняння (корені) – це такі значення $x = x^*$, $x^* \in [a, b]$ при яких рівняння перетворюється в тотожність. Універсальних методів для знаходження точних значень коренів алгебраїчних рівнянь степеня $p \geq 5$ і трансцендентних рівнянь не існує.

Метод вгадування і перевірки

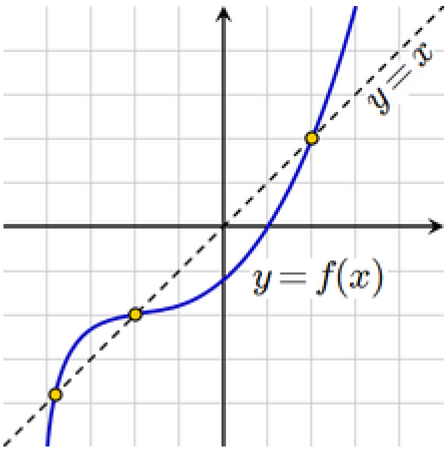
Іноді корінь рівняння можна вгадати. Зазвичай вгадування ґрунтується на певному додатковому знанні про задачу, наприклад, про симетрію функції. Вгаданий розв'язок потрібно підставити в рівняння й перевірити його справедливість або несправедливість.

Метод табуляції

Корінь рівняння можна знайти з певною точністю, якщо побудувати таблицю значень функції в залежності від значень аргументу. Такий метод у багатьох випадках дуже неефективний, бо вимагає великого числа обчислень. З іншого боку, функція може бути заданою таблично, наприклад, як результати вимірювань в залежності від параметра. Тоді знаходження кореня зводиться до аналізу значень, а його уточнення до інтерполяції між найближчими до нуля значеннями.

Графічний метод

Графічний метод зводиться до побудови графіка функції й візуального визначення точки, де вона перетинає вісь ординат. Іноді побудова графіка функції $F(x)$ складна, але рівняння можна переписати у вигляді $f(x) = g(x)$, де $f(x)$ та (x) - функції з простими графіками. Тоді графічний метод зводиться до знаходження точки перетину двох функцій.



Графічний метод особливо ефективний при якісному аналізі рівняння, коли потрібно визначити, чи існує корінь взагалі, або взнати число можливих коренів.

Чисельні методи

Для складних функцій застосовуються чисельні методи. Знаходження чисельного розв'язку можливе з певною точністю, тобто зводиться до визначення інтервалу, меншого від наперед заданого числа, в якому функція має принаймні один корінь.

Виділення області з одним коренем

Характерною ознакою існування кореня на певному інтервалі є те, що функція має на кінцях цього інтервалу різні знаки. Втім ця ознака може свідчити про наявність розривів у функції на цьому інтервалі, або ж про наявність непарної кількості простих нулів.

Алгоритми уточнення кореня

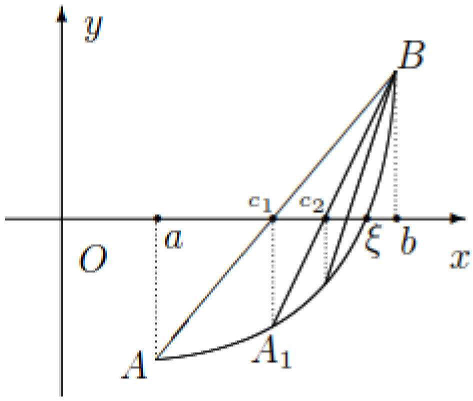
Ізолювавши інтервал, на якому існує один корінь, необхідно вибрати конкретний алгоритм знаходження кореня із заданою точністю. Алгоритми уточнення коренів поділяються на дві категорії - алгоритми звуження інтервалу та ітераційні алгоритми. Вибір алгоритму для чисельного знаходження кореня проводиться з урахуванням його ефективності. Алгоритм повинен проводити якомога менше обчислень функції, тобто працювати швидко, але, водночас, бути простим при програмуванні й застосуванні. Ітераційні алгоритми потребують перевірки на збіжність. Існує також велика кількість різноманітних комбінованих методів.

Звуження інтервалу

До методів звуження інтервалу належать, зокрема метод дихотомії та метод хорд.

Метод дихотомії, відомий також під назвами метод бісекції або метод ділення навпіл - найпростіший, надійний, але порівняно повільний метод. Суть методу в тому, що інтервал ділиться навпіл, обраховується значення функції в середній точці, й порівнюється її знак зі знаками функції на кінцях інтервалу. Така процедура дозволяє виділити наполовину менший інтервал із різними знаками функції на його кінцях. Її повторяють доти, доки довжина інтервалу не стане меншою від заданої точності.

Ефективніший - метод хорд. При його застосуванні точка всередині інтервалу вибирається з врахуванням абсолютних значень функції на його кінцях.



Ітераційні методи

Метод простої ітерації застосовують для розв'язування задач про нерухому точку, тобто рівнянь вигляду:

$$x = f(x).$$

Рівняння загального вигляду потрібно привести до цієї специфічної форми. Спочатку вибирається довільне наближене значення кореня, за яким знаходиться нове наближення. Таку процедуру проводять доти, доки нове значення не відрізнятиметься від старого на величину, меншу від заданої точності.

Метод ітерації не завжди збігається. Він із гарантією збіжний тоді, коли похідна від функції менша від одиниці. Практично перевірити цю вимогу буває складно.

Іншим ітераційним методом є метод дотичних (також відомий як метод Ньютона), при якому нове наближення знаходиться за допомогою лінійної інтерполяції функції. Для застосування методу дотичних потрібно знати похідну від функції.