

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

**Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский
государственный университет им. Н.И. Лобачевского»**

**А.А. Перов
А.П.Протогенов**

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Учебно-методическое пособие

Рекомендовано методической комиссией физического факультета
для студентов ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки
03.03.02 «Физика», 11.03.04 «Электроника и наноэлектроника»,
28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника»,
09.03.02 «Информационные системы и технологии»

Нижний Новгород
2018

УДК 518.12 + 519.6 (075.8)

ББК 22.193

П26

П26 **Перов А.А., Протогенов А.П.** ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ: Электронное учебно-методическое пособие. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2018.– 66 с.

Рецензент: к.ф.-м.н., доцент **Н.В. Сомов**

Рассматривается применение численных методов при решении задач, требующих общих физических вычислений. Приведены рекомендации по практическому применению алгоритмов. В конце каждого раздела формулируется задача для самостоятельного решения.

Для студентов физического факультета ННГУ, обучающихся по направлениям подготовки 03.03.02 «Физика», 11.03.04 «Электроника и нанoeлектроника», 28.03.01 «Нанотехнологии и микросистемная техника», 09.03.02 «Информационные системы и технологии». Адресовано также студентам других факультетов и институтов ННГУ, изучающим и применяющим численные методы при решении физических задач.

Ответственный за выпуск:

председатель методической комиссии физического факультета ННГУ,
к.ф.-м.н., доцент **А.А. Перов**

УДК 518.12 + 519.6 (075.8)

ББК 22.193

© А.А. Перов, А.П. Протогенов, 2018
© Национальный исследовательский
Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского, 2018

ВВЕДЕНИЕ

В курсах численных методов изучаются вопросы построения, обоснования и применения алгоритмов приближенного решения различных классов математических задач. Для численных методов характерна множественность, т.е. возможность решить одну и ту же задачу различными методами. В этой ситуации вновь возникающие задачи и быстрое развитие вычислительной техники стимулируют переоценку значения существующих алгоритмов и приводят к созданию новых.

Авторы настоящего методического пособия ставили перед собой задачу собрать материал, достаточный для постановки вычислительного эксперимента при решении различного рода физических задач. При этом мы рассмотрели только те методы, которые успешно применялись ранее при практических расчетах. Наибольшее внимание уделяется фундаментальным разделам численных методов - численному решению систем линейных и нелинейных алгебраических уравнений, разностным методам решения дифференциальных уравнений, численному интегрированию, а также, регрессионному анализу.

1. РАЗНОСТНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ

Сеткой на отрезке $[a, b]$ называется любое конечное множество N точек этого отрезка. Функция, определенная в точках сетки, называется **сеточной функцией**.

Равномерной сеткой на $[a, b]$ называется множество точек

$$\omega_h = \{x_i = a + i \cdot h, \quad i = 0, 1, 2, \dots\}, \quad (1.1)$$

где $h = (b - a) / N$ - шаг сетки.

Рассмотрим задачу о приближенном вычислении производных функции $u(x)$, определенной на отрезке $[a, b]$. Введем разностную сетку и обозначим [1-3]

$$u_i = u(x_i), \quad u_{x,i} = (u_i - u_{i-1}) / h, \quad (1.2.1)$$

$$u_{x,i} = (u_{i+1} - u_i)/h, \quad u_{x,i}^o = (u_{i+1} - u_{i-1})/2h. \quad (1.2.2)$$

Выписанные здесь разностные отношения называются, соответственно, *левой, правой и центральной разностными производными функции $u(x)$ в точке $x = x_i$.*

Если точка x_i фиксирована, а шаг h стремится к нулю, то каждое из упомянутых разностных соотношений стремится к производной функции $u(x)$ в точке x_i . Поэтому в качестве приближенного значения $u'(x)$ можно взять любое из этих разностных соотношений.

Нетрудно получить выражение для погрешности, возникающей при замене дифференциального выражения разностным [1]:

- $u_{x,i} - u'(x_i) = -\frac{h}{2} u''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_i)$ - аппроксимация первого порядка по h ;
- $u_{x,i} - u'(x_i) = \frac{h}{2} u''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_i, x_{i+1})$ - аппроксимация первого порядка по h ;
- $u_{x,i}^o - u'(x_i) = \frac{h^2}{6} u'''(\xi_i), \quad \xi_i \in (x_{i-1}, x_{i+1})$ - аппроксимация второго порядка по h .

Формулы численного дифференцирования для производных в центральных узлах приведены в Табл.1 [4].

Таблица 1.

Число узлов	Производные	Погрешности
3	$y' = (y_1 - y_{-1})/2h$ $y'' = (y_1 - 2y_0 + y_{-1})/h^2$	$h^2 y'''/6$ $h^2 y^{IV}/12$
5	$y' = (-y_2 + 8y_1 - 8y_{-1} + y_{-2})/12h$ $y'' = (-y_2 + 16y_1 - 30y_0 + 16y_{-1} - y_{-2})/12h^2$	$h^4 y^V/30$ $h^4 y^{VI}/90$

2. РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Решение нелинейных (в частности, трансцендентных уравнений) уравнений вида

$$f(x) = 0 \quad (2.1)$$

заключается в отыскании одного или всех корней на отрезке $[a, b]$ изменения x . Задача нахождения корней уравнения (2.1) обычно решается в два этапа. На первом этапе изучается расположение корней и проводится их разделение, т.е. выделяются области, содержащие только один корень. Изучается вопрос о кратности корней. Тем самым находят некоторые начальные приближения для корней уравнения (2.1). На втором этапе используется заданное начальное приближение, строится итерационный процесс, позволяющий уточнить значение отыскиваемого корня.

Численные методы решения нелинейных уравнений являются, как правило, итерационными методами, которые предполагают задание достаточно близких к искомому решению начальных данных.

Метод простой итерации.

Он состоит в том, что уравнение (2.1) заменяется эквивалентным уравнением [1]

$$x = s(x), \quad (2.2)$$

и итерации образуются по правилу

$$x_{n+1} = s(x_n), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.3)$$

причем задается начальное приближение x_0 . Для сходимости большое значение имеет выбор функции $s(x)$. Обычно она берется в виде

$$s(x) = x + \tau(x) f(x), \quad (2.4)$$

причем функция $\tau(x)$ не меняет знака на том отрезке, где отыскивается корень.

Определение. Функция $s(x)$ называется липшиц-непрерывной с постоянной q на множестве X , если для всех $x', x'' \in X$ выполняется неравенство

$$|s(x') - s(x'')| \leq q|x' - x''|. \quad (2.5)$$

В дальнейшем в качестве X будем брать отрезок

$$U_r(a) = \{x | |x - a| \leq r\} \quad (2.6)$$

длины $2r$ с серединой в точке a .

Теорема о сходимости.

Если $s(x)$ липшиц-непрерывна с постоянной $q \in (0,1)$ на отрезке $U_r(a)$, причем

$$|s(a) - a| \leq (1 - q)r, \quad (2.7)$$

то уравнение (2.2) имеет на отрезке $U_r(a)$ единственное решение x_* , и метод простой итерации сходится к x_* при любом начальном приближении $x_0 \in U_r(a)$. Для погрешности справедлива оценка [1]

$$|x_k - x_*| \leq q^k |x_0 - x_*|, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.8)$$

Следствие. Если

$$|s'(x)| \leq q < 1 \quad (2.9)$$

для $x \in U_r(a)$, выполнено условие (2.7) и $x_0 \in U_r(a)$, то уравнение (2.2) имеет единственное решение $x_* \in U_r(a)$, метод (2.3) сходится, и справедлива оценка (2.8).

Замечание. Если для погрешности какого-либо итерационного метода выполняется неравенство

$$|x_k - x_*| \leq M \cdot q^k |x_0 - x_*|, \quad (2.10)$$

где $q \in (0,1)$ и M не зависит от k , то говорят, что метод сходится линейно со скоростью геометрической прогрессии со знаменателем q . Такая терминология объясняется тем, что при $k \rightarrow \infty$ погрешность убывает как q^k .

Итерационный процесс в методе простых итераций нужно прекратить, если выполнено условие [5]:

$$\left| q \frac{x_k - x_{k-1}}{1 - q} \right| = \frac{(x_k - x_{k-1})^2}{|2x_{k-1} - x_k - x_{k-2}|} < \varepsilon,$$

где $\varepsilon \ll 1$ - заданная точность.

Пример: Пусть дано уравнение $x^2 = a$. Для решения этого уравнения методом простых итераций можно положить

$$s(x) = a/x \quad \text{или} \quad s(x) = \frac{1}{2} \left(x + \frac{a}{x} \right).$$

В результате получаем два итерационных процесса, первый из которых вообще не сходится, а второй сходится очень быстро при любом начальном приближении, поскольку $s'(x_*) = 0$.

Метод Ньютона.

Пусть начальное приближение x_0 известно. Заменяем $f(x)$ отрезком ряда Тейлора [3]

$$f(x) \approx H_1(x) = f(x_0) + (x - x_0) f'(x_0) \quad (2.11)$$

и за следующее приближение x_1 возьмем корень уравнения $H_1(x) = 0$, т.е.

$$x_1 = x_0 - f(x_0) / f'(x_0). \quad (2.12)$$

Вообще, если известна итерация x_k , то следующее приближение x_{k+1} в методе Ньютона определяется по правилу

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k) / f'(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.13)$$

Этот метод называют также методом касательных, поскольку новое приближение x_{k+1} является абсциссой точки пересечения касательной, проведенной в точке $(x_k, f(x_k))$ к графику функции $f(x)$ с осью Ox .

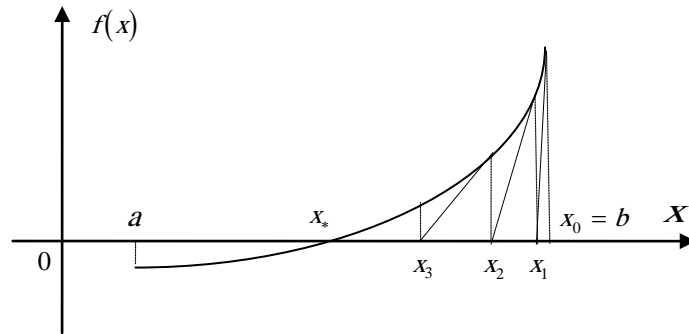


Рис.1.

Заметим также, что выражение (2.13) можно рассматривать как частный случай метода простой итерации, для которого $s(x) = x - f(x)/f'(x)$. Метод Ньютона имеет квадратичную сходимость [4], т.е. $x_{k+1} - x_* = \mathcal{O}\left((x_k - x_*)^2\right)$. Это означает, например, что если $(k-1)$ -ая итерация давала три верных знака, то k -ая даст шесть верных знаков, а $(k+1)$ -ая --- 12 знаков. Быстрая сходимость метода Ньютона гарантирована лишь при близких к точному решению начальных приближениях. Если начальное приближение выбрано неудачно, то метод может сходиться медленно или не сойдется вообще.

Модифицированный метод Ньютона

$$x_{k+1} = x_k - f(x_k)/f'(x_k), \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (2.14)$$

применяют в том случае, когда хотят избежать многократного вычисления производной $f'(x)$. Метод (2.14) предъявляет меньше требований к выбору начального приближения, однако обладает лишь линейной сходимостью, т.е. $x_{k+1} - x_* = \mathcal{O}(x_k - x_*)$. Метод гарантирует отсутствие деления на нуль, если $f'(x_0) \neq 0$.

Метод секущих.

Этот метод получается из метода Ньютона (2.13) заменой $f'(x_k)$ разделенной разностью $(f(x_k) - f(x_{k-1})) / (x_k - x_{k-1})$, вычисленной по известным значениям x_k и x_{k-1} . В результате получаем итерационный метод [2]

$$x_{k+1} = x_k - \frac{x_k - x_{k-1}}{f(x_k) - f(x_{k-1})} f(x_k), \quad k = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.15)$$

который является *двухшаговым*, т.е. новое приближение x_{k+1} определяется двумя предыдущими итерациями x_k и x_{k-1} . В методе необходимо задавать два начальных приближения x_0 и x_1 .

При замене производной $f'(x_k)$ разностным отношением скорость и монотонность сходимости изменяются. Можно показать [5], что скорость сходимости определяется соотношением $x_{k+1} - x_* = O((x_k - x_*)^\beta)$, где $\beta = (\sqrt{5} + 1)/2 \approx 1.62$ (в методе Ньютона $\beta = 2$). Заметим, что число $\beta = (\sqrt{5} + 1)/2$ называется «золотым сечением».

Геометрическая интерпретация метода секущих состоит в следующем. Через точки $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$, $(x_k, f(x_k))$ проводится прямая, абсцисса точки пересечения которой с осью Ox является новым приближением x_{k+1} .

Метод дихотомии.

Метод дихотомии (деления отрезка $[a, b]$ пополам) реализуется следующим алгоритмом [4] (для $f(a) > 0$).

1. Находим $x = (a + b)/2$.
2. Вычисляем $f(x)$.
3. Если $f(x) > 0$, задаем $a = x$, иначе $b = x$.

4. Проверяем условие $b - a > \varepsilon$ (где ε - точность вычислений); если оно выполняется, идем к п.1, если не выполняется, заканчиваем вычисления и полагаем, что $X_* = X$ с заданной точностью ε .

Число итераций при использовании этого метода $N \approx \ln((b - a)/\varepsilon) / \ln 2$ значительно, и поэтому сходимость его медленная. Однако при любой ширине отрезка $[a, b]$ сходимость гарантирована. Кроме того, простота реализации метода уменьшает число вспомогательных операций и частично компенсирует увеличение общего времени счета из-за медленной сходимости.

Один из недостатков метода дихотомии - сходимость неизвестно к какому корню. Его можно устранить удалением уже найденного корня [5].

Метод Эйткена - Стеффенсона с ускоренной сходимостью.

Данный метод обеспечивает решение нелинейного уравнения (3) по следующему алгоритму [4].

1. Задаем начальное приближение $X_n = X_0$.
2. Находим первое $X_1 = f(X_0)$ и второе $X_2 = f(X_1)$ приближения.
3. Вычисляем $X_{n+1} = (X_0 X_2 - X_1^2) / (X_0 - 2X_1 + X_2)$.
4. Проверяем условия $|X_{n+1} - X_n| > \varepsilon$, $X_0 - 2X_1 + X_2 \neq 0$. Если эти условия соблюдаются, идем к п.1, т.е. присваиваем X_n новое значение, равное X_{n+1} . В противном случае останавливаем счет и получаем корень уравнения $X_* = X_{n+1}$.

Метод Эйткена - Стеффенсона при сложных $f(x)$ имеет ускоренную сходимость по сравнению с методом простых итераций. Однако, для простых $f(x)$ время счета практически не уменьшается [1].

Написать программы вычисления корня уравнения $x^2 - x - 2 = 0$ при $x \in [-3; 0]$ методами Ньютона и дихотомии.

3. СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Методы решения линейных систем делятся на *прямые* и *итерационные*. Прямые методы дают решение за конечное число действий, они просты и наиболее универсальны. Для систем небольшого порядка $n \leq 200$ применяются практически только прямые методы. Итерационные методы выгодны для систем специального вида, со слабо заполненной матрицей достаточно большого порядка $n \approx 10^3 \div 10^5$.

Метод исключения Гаусса.

Данный метод основан на приведении матрицы коэффициентов a_{ij} системы линейных уравнений

$$a_{ij}x_j = b_i, \quad 1 < i < n, \quad (3.1)$$

где x - искомый, а b - заданный векторы, к треугольному виду. При этом алгоритм решения системы (3.1) следующий.

Пусть определитель матрицы системы отличен от нуля. Тогда по теореме Кронекера-Капелли система n линейных неоднородных уравнений с n неизвестными имеет единственное решение.

Вычтем из второго уравнения системы (3.1) первое, умноженное на такое число, чтобы уничтожился коэффициент при x_1 во втором уравнении. Затем таким же образом вычтем первое уравнение из третьего, четвертого и т.д. Тогда исключатся все коэффициенты первого столбца, лежащие ниже главной диагонали.

Затем при помощи второго уравнения исключим из третьего, четвертого и т.д. уравнений коэффициенты второго столбца. Последовательно продолжая этот процесс, исключим из матрицы все коэффициенты, лежащие ниже главной диагонали.

Запишем общие формулы процесса [1-3,5,8]. Пусть проведено исключение коэффициентов из $k-1$ столбца. Тогда остались следующие уравнения с ненулевыми элементами ниже главной диагонали:

$$\sum_{j=k}^n a_{ij}^{(k)} x_j = b_i^{(k)}, \quad k \leq i \leq n. \quad (3.2)$$

Умножим k -ю строку на число

$$c_{mk} = a_{mk}^{(k)} / a_{kk}^{(k)}, \quad m > k \quad (3.3)$$

и вычтем из m -й строки. Первый ненулевой элемент этой строки обратится в нуль, а остальные изменятся по формулам

$$\begin{aligned} a_{ml}^{(k+1)} &= a_{ml}^{(k)} - c_{mk} a_{kl}^{(k)}, \\ b_m^{(k+1)} &= b_m^{(k)} - c_{mk} b_k^{(k)}, \quad k < m, \quad l \leq n. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Производя вычисления по этим формулам при всех указанных индексах, исключим элементы k -го столбца. Будем называть такое исключение *циклом* процесса Приведение матрицы исходной системы (3.1) к треугольному виду называется *прямым ходом* исключения. Треугольная система уравнений легко решается *обратным ходом* по формулам

$$x_k = \frac{1}{a_{kk}} \left(b_k - \sum_{l=k+1}^n a_{kl} x_l \right), \quad k = n, n-1, \dots, 1, \quad (3.5)$$

если $a_{kl} = 0$ при $k > l$. В формулах (3.5) всем коэффициентам надо приписать вверху (в скобках) индекс строки.

Замечания.

- Исключение по формулам (3.3)-(3.4) нельзя проводить, если в ходе расчета на главной диагонали оказался нулевой элемент $a_{kk}^{(k)} = 0$. Но в первом столбце промежуточной системы (3.2) все элементы не могут быть нулями: это означало бы, что определитель матрицы системы $\det A = 0$. Перестановкой строк можно переместить ненулевой элемент на главную диагональ и продолжить расчет.
- Если элемент на главной диагонали $a_{kk}^{(k)}$ мал, то эта строка умножается на большие числа c_{mk} , что приводит к значительным ошибкам округления при вычитании. Чтобы этого избежать, каждый цикл всегда начинают с перестановки строк. Среди элементов столбца $a_{mk}^{(k)}$, $m \geq k$, находят *главный*, т.е. наибольший по модулю в k -м столбце, и перестановкой строк переводят его на главную диагональ, после чего делают исключения. В методе Гаусса с выбором главного элемента погрешность округления обычно невелика.

- Погрешность округления можно еще уменьшить, если выбирать в каждом цикле элемент, максимальный по модулю во всей матрице. Точность вычислений при этом возрастает не значительно, а расчет заметно усложняется, поскольку требуется перестановка не только строк, но и столбцов.
- Для контроля расчета полезно найти *невязки* [1]:

$$r_k = b_k - \sum_{l=1}^n a_{kl}x_l, \quad 1 \leq k \leq n.$$

Если они велики, то это означает грубую ошибку в расчете.

Подсчет числа действий

Подсчитаем число арифметических операций, необходимых для решения системы (3.1) по методу Гаусса [1].

- Вычисление коэффициентов c_{kj} , $k = 1, 2, \dots, n$,

$j = k + 1, k + 2, \dots, n$, требует $\sum_{k=1}^n (n - k) = n(n - 1)/2$ делений.

- Вычисление всех коэффициентов $a_{ij}^{(k)}$ по формулам (3.4) требует

$$\sum_{k=1}^{n-1} (n - k)^2 = \frac{(n - 1) \cdot n \cdot (2n - 1)}{6}$$

умножений.

Таким образом, вычисление ненулевых элементов треугольной матрицы требует

$$\frac{n \cdot (n^2 - 1)}{3}$$

операций умножения и деления. При больших n это число действий приблизительно равно $n^3/3$.

- Вычисление правых частей преобразованной треугольной системы требует $n + n(n - 1)/2$ действий умножения и деления.

В итоге для осуществления прямого хода метода Гаусса необходимо выполнить

$$\frac{n(n+1)(2n+1)}{6}$$

действий деления и умножения.

- Для осуществления обратного хода метода Гаусса (3.5) требуется

$$\sum_{i=1}^{n-1} (n-i) = \frac{n(n-1)}{2}$$

умножений.

Итак, для реализации метода Гаусса требуется выполнить

$$\frac{n(n^2 + 3n - 1)}{3}$$

действий умножения и деления. Основное время расчета затрачивается на осуществление прямого хода. Для больших n число действий умножения и деления в методе Гаусса близко к $n^3/3$. При этом учет всех арифметических операций (включая сложение и вычитание) дает приблизительно $2n^3/3$ операций.

Метод квадратного корня.

Этот метод пригоден только для линейных систем с эрмитовской матрицей $A = A^+$ [5]. Формулы расчета при этом несколько сложнее, чем в методе Гаусса. Зато метод квадратного корня вдвое быстрее метода Гаусса.

Метод основан на представлении эрмитовской матрицы системы в виде произведения трех матриц

$$A = S^+ D S. \quad (3.6)$$

Здесь D - диагональная матрица с элементами $d_{ii} = \pm 1$, S - верхняя треугольная матрица ($s_{ik} = 0$ при $i > k$) с вещественными положительными диагональными коэффициентами $s_{ii} > 0$. S^+ - эрмитово сопряженная к ней нижняя треугольная матрица.

Соотношение (3.6) перепишем в виде

$$a_{kl} = \sum_{i=1}^n s_{ki}^* d_{ii} s_{il}. \quad (3.7)$$

Последнее равенство можно записать в форме:

$$\begin{aligned} a_{kk} &= \sum_{i=1}^k d_{ii} |s_{ik}|^2, \\ a_{kl} &= \sum_{i=1}^k d_{ii} s_{ki}^* s_{il}, \quad k < l, \end{aligned} \quad (3.8)$$

или окончательно

$$\begin{aligned} d_{kk} &= \text{sign} \left(a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_{ii} |s_{ik}|^2 \right), \\ s_{kk} &= \sqrt{\left| a_{kk} - \sum_{i=1}^{k-1} d_{ii} |s_{ik}|^2 \right|}, \\ s_{kl} &= \frac{a_{kl} - \sum_{i=1}^{k-1} d_{ii} s_{ki}^* s_{il}}{s_{kk} d_{kk}} \quad \text{при } k+1 \leq l \leq n. \end{aligned} \quad (3.9)$$

В этих формулах сначала полагаем $k=1$ и последовательно вычисляем все элементы первой строки матрицы S . При $k=1$ все суммы в формулах (3.9) отсутствуют. Далее задаем $k=2$ и вычисляем вторую строку и т.д.

Когда все элементы матриц найдены, решение линейной системы (3.1) сводится к последовательному решению трех систем, двух треугольных и одной диагональной:

$$S^+ z = b, \quad Dy = z, \quad Sx = y, \quad (3.10)$$

что делается обычным обратным ходом по формулам

$$\begin{aligned} y_1 &= b_1 / s_{11} d_{11}, \\ y_i &= \left(b_i - \sum_{l=1}^{i-1} d_{il} y_l s_{il}^* \right) / s_{ii} d_{ii}, \quad i = 2, 3, \dots, n, \\ x_n &= y_n / s_{nn}, \\ x_i &= \left(y_i - \sum_{l=i+1}^n s_{il} x_l \right) / s_{ii}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Определитель матрицы вычисляется по формуле

$$\det A = \prod_{i=1}^n d_{ii} s_{ii}^2.$$

Метод квадратного корня требует примерно $n^3/3$ арифметических операций, т.е. при больших n он вдвое быстрее метода Гаусса, и занимает вдвое меньше ячеек памяти, поскольку использует информацию о симметрии матрицы системы.

Замечание. Расчет по формулам (3.9) невозможен, если при некотором значении индекса элемент $s_{kk} = 0$. От этого можно избавиться, переставив на место a_{kk} другой диагональный элемент $a_{ll} \neq 0$.

Метод простой итерации.

Простейшим итерационным методом решения систем линейных уравнений является метод простой итерации [1]. Система уравнений (3.1) преобразуется к виду

$$x = Bx + c, \quad (3.12)$$

и ее решение находится как предел последовательности

$$x^{n+1} = Bx^n + c, \quad (3.13)$$

при заданном начальном приближении x^0 .

Теорема (о достаточном условии сходимости метода простой итерации) [2].

Если норма матрицы $\|B\| = \sup_{x \neq 0} \frac{\|Bx\|}{\|x\|} < 1$ то система уравнений (3.12)

имеет единственное решение и итерационный процесс (3.13) сходится к решению со скоростью геометрической прогрессии.

В заключение раздела приведем еще одну теорему, касающуюся сходимости метода простой итерации.

Теорема (о необходимом и достаточном условии сходимости метода простой итерации) [2].

Пусть система (3.12) имеет единственное решение. Итерационный процесс (3.13) сходится к решению системы (3.12) при любом началь-

ном приближении тогда и только тогда, когда все собственные значения матрицы B по модулю меньше единицы.

Метод Зейделя.

Пусть решается система уравнений (3.1), все диагональные элементы которой не равны нулю. В итерационном методе Зейделя последовательно уточняются компоненты решения, причем k -я компонента находится из k -го уравнения [1]. Именно, если $x^m = (x_1^m, x_2^m, \dots, x_n^m)$, то следующее приближение определяется из системы соотношений:

$$\begin{cases} a_{11}x_1^{m+1} + a_{12}x_2^m + \dots + a_{1n}x_n^m = b_1, \\ a_{21}x_1^{m+1} + a_{22}x_2^{m+1} + a_{23}x_3^m + \dots + a_{2n}x_n^m = b_2, \\ \dots \\ a_{n1}x_1^{m+1} + a_{n2}x_2^{m+1} + \dots + a_{nn}x_n^{m+1} = b_n. \end{cases} \quad (3.14)$$

Систему (3.14) можно представить в виде

$$Bx^{m+1} + Cx^m = b, \quad (3.15)$$

где

$$B = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ a_{21} & a_{22} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & 0 & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Отсюда получаем

$$x^{m+1} = -B^{-1}Cx^m + B^{-1}b. \quad (3.16)$$

Таким образом, метод Зейделя эквивалентен методу простой итерации. Поэтому для его сходимости при любом начальном приближении необходимо и достаточно, чтобы все собственные значения матрицы $-B^{-1}C$ были по модулю меньше единицы. Вследствие равенства

$$\det[-B^{-1}C - \lambda E] = \det[-B^{-1}] \det[C + \lambda B]$$

собственные значения матрицы $-B^{-1}C$ являются корнями уравнения $\det[C + \lambda B] = 0$. Таким образом, необходимое и достаточное условие

сходимости метода Зейделя можно сформулировать следующим образом: все корни уравнения

$$\det \begin{bmatrix} a_{11}\lambda & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21}\lambda & a_{22}\lambda & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1}\lambda & a_{n2}\lambda & \dots & a_{nn}\lambda \end{bmatrix} = 0 \quad (3.17)$$

по модулю меньше единицы.

Написать программу поиска решения системы линейных уравнений

$$\begin{cases} x_1 - x_2 + x_3 - 3x_4 + x_5 = 0, \\ 2x_1 - x_2 + 2x_3 - x_4 + x_5 = 3, \\ x_1 + 3x_2 + x_3 - 2x_4 - x_5 = -1, \\ 3x_1 - 2x_2 - x_3 + x_4 + 2x_5 = 12, \\ x_1 + x_2 - x_3 - 2x_4 + x_5 = 5, \end{cases}$$

методом исключения Гаусса.

4. СИСТЕМЫ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ

Рассмотрим систему нелинейных уравнений

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

где $x = (x_1, x_2, \dots, x_m)$, $f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x))$.

Многие одношаговые итерационные методы решения системы (4.1) можно записать в виде

$$B_{k+1} \frac{x^{k+1} - x^k}{\tau_{k+1}} + f(x^k) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad x_0 - \text{задан}, \quad (4.2)$$

где k - номер итерации,

$$x^k = (x_1^k, x_2^k, \dots, x_m^k),$$

τ_{k+1} - числовые параметры, B_{k+1} - матрица $m \times m$, имеющая обратную.

Для нахождения x^{k+1} по известному x^k из уравнения (4.2) необходимо решить систему линейных алгебраических уравнений

$$B_{k+1}x^{k+1} = g(x^k), \quad (4.3)$$

где $g(x^k) = B_{k+1}x^k - \tau_{k+1}f(x^k)$. Метод (4.2) называется **явным**, если $B_{k+1} = E$ для всех k , и **неявным** - в противном случае. Метод (4.2) называется **стационарным**, если B и τ не зависят от номера итерации k .

Метод релаксации.

Метод релаксации представляет собой частный случай метода (4.2) при $B_{k+1} = E$ и $\tau_{k+1} = \tau$. Это стационарный итерационный метод, который можно записать в виде [1,3]

$$x^{k+1} = S(x^k), \quad (4.4)$$

где $S(x) = x - \tau \cdot f(x)$. Метод сходится, если $\|S'(x_*)\| < 1$. В данном случае $S'(x) = E - \tau \cdot f'(x)$ и

$$f'(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1(x)}{\partial x_m} \\ \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2(x)}{\partial x_m} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_m(x)}{\partial x_m} \end{bmatrix}. \quad (4.5)$$

Метод Ньютона.

Метод Ньютона для решения системы нелинейных уравнений (4.1) строится следующим образом [1,4]. Пусть приближение x^k известно. Выписывая разложение функции $f_i(x)$ по формуле Тейлора в

линейном по $(x_j - x_j^k)$ приближении, получаем линейную систему уравнений относительно приращений $(x_j - x_j^k)$

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i(x^k)}{\partial x_j} (x_j - x_j^k) + f_i(x^k) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, m. \quad (4.6)$$

Решение системы (4.6) принимается за следующее приближение. Таким образом, итерационный метод Ньютона для системы (4.1) определяется системой уравнений

$$\sum_{j=1}^m \frac{\partial f_i(x^k)}{\partial x_j} (x_j^{k+1} - x_j^k) + f_i(x^k) = 0, \quad i = 1, 2, 3, \dots, m, \quad (4.7)$$

из которого последовательно, начиная с заданного x^0 , находят векторы x^k . Итерационный процесс повторяется до тех пор, пока $|x_j^{k+1} - x_j^k|$ не станет меньше заданной точности ε .

Систему (4.7) можно записать в векторном виде

$$f'(x^k)(x^{k+1} - x^k) + f(x^k) = 0, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad x^0 \text{ задан}, \quad (4.8)$$

где матрица $f'(x)$ определена согласно (4.5). Таким образом, метод Ньютона имеет канонический вид (4.2), где

$$B_{k+1} = f'(x^k), \quad \tau_{k+1} = 1.$$

Для реализации метода Ньютона необходимо существование обратных матриц $(f'(x^k))^{-1}$ для $f'(x^k)$. Метод Ньютона имеет квадратичную сходимость, если начальное приближение выбрано достаточно близко к вектору x решения системы.

Модифицированный метод Ньютона.

Этот метод имеет линейную сходимость и имеет вид

$$f'(x^0)(x^{k+1} - x^k) + f(x^k) = 0. \quad (4.9)$$

Упрощение в численной реализации по сравнению с обычным методом Ньютона состоит в том, что матрицу $f'(x)$ нужно обращать не на каж-

дой итерации, а только один раз. Возможно циклическое применение модифицированного метода Ньютона, когда $f'(x)$ обращается через определенное число итераций.

Написать программу численного решения системы нелинейных уравнений

$$\begin{cases} x_1 + 3 \lg x_1 - x_2^2 = 0, \\ 2x_1 - x_1 x_2 - 5x_2 + 1 = 0, \end{cases}$$

методом Ньютона.

5. СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Численные методы решения систем дифференциальных уравнений - это алгоритмы вычисления приближенных (а иногда - точных) значений искомого решения $U(x)$ на некоторой выбранной сетке значений аргумента x_n . Численные методы не позволяют найти общего решения системы дифференциальных уравнений; они могут дать только какое-то частное ее решение (например, решение задачи Коши). Это основной недостаток численных методов. В то же время, эти методы применимы к очень широким классам уравнений и всем типам задач для них.

Численные методы можно применять только к корректно поставленным (регуляризованным) задачам. Необходимо, чтобы задача была *хорошо обусловлена*, т.е. малые изменения начальных условий приводили бы к малым изменениям интегральных кривых. Если это условие не выполнено, то небольшие изменения начальных условий или эквивалентные этим изменениям небольшие погрешности численного метода могут сильно исказить решение.

Задача Коши заключается в решении систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, представляемых в виде

$$\begin{cases} \frac{dy_1}{dx} = F_1(x, y_1, \dots, y_N), \\ \dots\dots\dots \\ \frac{dy_N}{dx} = F_N(x, y_1, \dots, y_N), \end{cases} \quad (5.1)$$

где y_j - зависимые переменные ($j = 1, \dots, N$), x - независимая переменная, при заданных начальных условиях:

$$x = x_0; \quad y_1 = y_{10}, \dots, y_N = y_{N0}.$$

Обобщенная форма записи каждого из уравнений системы (5.1) может быть представлена в виде

$$\frac{dY_j}{dx} = F_j(x, Y_j), \quad (5.2)$$

где Y_j - векторы переменных y_1, \dots, y_N , а F_j - правая часть каждого из уравнений системы (5.1).

Дифференциальные уравнения высшего порядка

$$y^{(n)} = F(x, y, y', y'', \dots, y^{(n-1)}), \quad (5.3)$$

где n - порядок дифференциального уравнения, могут быть сведены к системам вида (5.1) с помощью преобразований:

$$\begin{cases} dy/dx = y_1, \\ dy_1/dx = y_2, \\ \dots\dots\dots \\ dy_{n-2}/dx = y_{n-1}, \\ dy_{n-1}/dx = F(x, y, y_1, y_2, \dots, y_{n-1}). \end{cases} \quad (5.4)$$

Метод Эйлера - Коши.

Метод Эйлера - Коши является простейшим методом первого порядка для численного интегрирования дифференциальных уравнений. Он реализуется следующей рекуррентной формулой [4]:

$$Y_j^{i+1} = Y_j^i + h \cdot F_j(x^i, Y_j^i), \quad (5.5)$$

где h - шаг интегрирования (приращение переменной x). Этот метод обладает большой погрешностью и имеет систематическое накопление ошибок. Погрешность метода пропорциональна h^2 .

Метод Эйлера - Коши с итерациями.

Данный метод заключается в вычислении на каждом шаге начального значения

$$Y_{(0)j}^{i+1} = Y_j^i + h \cdot F_j(x^i, Y_j^i). \quad (5.6)$$

Затем с помощью итерационной формулы [4]

$$Y_{(k)j}^{i+1} = Y_j^i + \frac{h}{2} \left[F_j(x^i, Y_j^i) + F_j(x^{i+1}, Y_{(k-1)j}^{i+1}) \right] \quad (5.7)$$

решение уточняется. Итерации проводят до тех пор, пока не совпадает заданное число цифр результата на двух последних шагах итераций. Погрешность метода пропорциональна h^3 . Обычно число итераций не должно превышать 3 - 4, иначе нужно уменьшить шаг h .

Метод трапеций.

Метод реализуется применением на каждом шаге формулы [1,3,4-5]

$$Y_j^{i+1} = Y_j^i + \frac{1}{2} (K_{j1} + K_{j2}), \quad (5.8)$$

где $K_{j1} = h \cdot F_j(x^i, Y_j^i)$, $K_{j2} = h \cdot F_j(x^i + h, Y_j^i + K_{j1})$ и дает погрешность порядка h^3 . Этот метод относится к общим методам Рунге - Кутты.

Методы Рунге - Кутта.

Метод Рунге - Кутта четвертого порядка

является наиболее распространенным методом решения систем (5.1) при шаге $h = const$ [1,4,5]. Его достоинством является высокая точность - погрешность порядка h^5 - и малая склонность к возникновению неустойчивости решения. Кроме того, все методы Рунге - Кутта являются явными, т.е. значения Y_j^{i+1} вычисляются по ранее найденным значениям за определенное число действий. Алгоритм реализации метода Рунге - Кутта заключается в циклических вычислениях Y_j^{i+1} на каждом $i+1$ -ом шаге по следующим формулам:

$$\begin{aligned} K_{1j} &= h \cdot F_j(x^i, Y_j^i), \\ K_{2j} &= h \cdot F_j(x^i + h/2, Y_j^i + K_{1j}/2), \\ K_{3j} &= h \cdot F_j(x^i + h/2, Y_j^i + K_{2j}/2), \\ K_{4j} &= h \cdot F_j(x^i + h, Y_j^i + K_{3j}), \end{aligned} \tag{5.9}$$

$$Y_j^{i+1} = Y_j^i + \frac{1}{6} (K_{1j} + 2K_{2j} + 2K_{3j} + K_{4j}).$$

Для начала расчета необходимо выбрать сетку по независимой переменной и задать начальные условия.

Метод Рунге - Кутта для дифференциального уравнения второго порядка вида $y'' = F(x, y, y')$

Ввиду особого значения и широкого применения дифференциальных уравнений второго порядка полезно иметь специальную программу для их решения [4]. Указанный метод Рунге - Кутта имеет погрешность порядка h^5 и реализуется с помощью следующих формул:

$$\begin{aligned}
K_1 &= h \cdot F(x_i, y_i, y'_i), \\
K_2 &= h \cdot F\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} y'_i + \frac{h}{8} K_1, y'_i + \frac{K_1}{2}\right), \\
K_3 &= h \cdot F\left(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2} y'_i + \frac{h}{8} K_1, y'_i + \frac{K_2}{2}\right), \\
K_4 &= h \cdot F\left(x_i + h, y_i + h \cdot y'_i + \frac{h}{2} K_3, y'_i + K_3\right), \quad (5.10)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
y_{i+1} &= y_i + h \left[y'_i + \frac{1}{6} (K_1 + K_2 + K_3) \right], \\
y'_{i+1} &= y'_i + \frac{1}{6} (K_1 + 2K_2 + 2K_3 + K_4).
\end{aligned}$$

Перед началом вычислений необходимо задать шаг h и начальные значения x_0, y_0, y'_0 .

Замечание. Все схемы Рунге - Кутты допускают расчет с переменным шагом. Следовательно, нетрудно уменьшить шаг там, где функция быстро меняется, и увеличить его в обратном случае. Метод Рунге - Кутта с автоматическим изменением шага интегрирования заключается в том, что после вычисления Y_j^{i+1} с шагом h все вычисления проводятся повторно с половинным шагом. Полученный результат \tilde{Y}_j^{i+1} сравнивается с Y_j^{i+1} . Если $|Y_j^{i+1} - \tilde{Y}_j^{i+1}| < \varepsilon$, вычисления продолжают с шагом h , в противном случае шаг уменьшают. Если же данное неравенство слишком сильное, то шаг интегрирования наоборот увеличивают. Погрешности методов с автоматическим изменением шага есть величины порядка h^5 .

Метод Рунге - Кутты - Мерсона с автоматическим изменением шага интегрирования.

Метод признан лучшим в своем классе, обеспечивает приближенную оценку погрешности на каждом шаге интегрирования. Этот метод реализуется следующим алгоритмом [4].

1. Задаем число уравнений N , погрешность $\varepsilon = E$, начальный шаг интегрирования $h = H$ и начальные значения: X^0, Y_j^0 .
2. С помощью пяти циклов с управляющей переменной $j = 1, \dots, N$ вычисляем коэффициенты

$$\begin{aligned} K_{0j} &= h \cdot F_j(X^j, Y_j^j), \\ K_{1j} &= h \cdot F_j\left(X^j + \frac{1}{3}h, Y_j^j + \frac{1}{3}K_{0j}\right), \\ K_{2j} &= h \cdot F_j\left(X^j + \frac{1}{3}h, Y_j^j + \frac{1}{6}K_{0j} + \frac{1}{6}K_{1j}\right), \\ K_{3j} &= h \cdot F_j\left(X^j + \frac{1}{2}h, Y_j^j + \frac{1}{8}K_{0j} + \frac{3}{8}K_{2j}\right), \\ K_{4j} &= h \cdot F_j\left(X^j + h, Y_j^j + \frac{1}{2}K_{0j} - \frac{3}{2}K_{2j} + 2K_{3j}\right). \end{aligned} \quad (5.11)$$

3. Находим в последнем цикле значение

$$Y_j^{i+1} = Y_j^i + \frac{K_{0j} + 4K_{3j} + K_{4j}}{6} \quad (5.12)$$

и погрешность

$$R_j^{i+1} = \frac{-2K_{0j} + 9K_{2j} - 8K_{3j} + K_{4j}}{30}. \quad (5.13)$$

4. Проверяем выполнение условий

$$\left|R_j^{i+1}\right| \leq E, \quad \left|Y_j^{i+1}\right| \geq E/30. \quad (5.14)$$

Если первое условие не выполняется, делим шаг h пополам и повторяем вычисления с п.2, восстановив начальные значения Y_j^i . Если

ли выполнены оба условия, то значения Y_j^{i+1} и $X^{i+1} = X^i + h$ выводятся на печать. Если второе условие не выполняется, то шаг h увеличивается вдвое, и вычисления опять повторяются с п.2.

Несколько полезных замечаний.

Какими из формул Рунге - Кутта целесообразно пользоваться в каждом конкретном случае и как выбирать шаг сетки?

Если правая часть дифференциального уравнения (уравнений) непрерывна и ограничена вместе со своими четвертыми производными (и эти производные не слишком велики), то хорошие результаты дает схема четвертого порядка (5.9) благодаря очень малому коэффициенту в остаточном члене и быстрому возрастанию точности при уменьшении шага.

Шаг сетки следует выбирать настолько малым, чтобы обеспечить требуемую точность расчетов. Других ограничивающих шаг условий в методе Рунге - Кутта нет.

Встречаются задачи, в которых функции являются достаточно гладкими, но настолько быстро меняющимися, что схемы Рунге - Кутта как низкого (например, второго), так и высокого порядка точности требуют неприемлемо малого шага интегрирования для получения удовлетворительного результата. В таких случаях задачи требуют специальных методов численного решения, ориентированных на данный узкий класс задач.

Методом Рунге-Кутта четвертого порядка решить систему уравнений Гамильтона для заряженной частицы в постоянном однородном магнитном поле.

6. ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ФУНКЦИЙ

Будем считать функцию $f(x)$ и полином $Q_m(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_mx^m$ близкими, если они совпадают на заданном множестве точек X_0, X_1, \dots, X_n . Эти точки называются узлами интерполяции. В результате мы приходим к следующей задаче интерполи-

Интерполяционные полиномы Лагранжа и Ньютона.

Полином, коэффициенты которого определяются из системы уравнений (6.2), называется *интерполяционным полиномом Лагранжа* для функции $f(x)$ и может быть записан в явном виде [9]

$$L_n(x) = \sum_{i=0}^n \frac{(x-x_0)(x-x_1)\cdots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\cdots(x-x_n)}{(x_i-x_0)(x_i-x_1)\cdots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\cdots(x_i-x_n)} \cdot y_i. \quad (6.4)$$

В случае *равноотстоящих узлов интерполирования* $x_i = x_0 + i \cdot h$ (h - шаг таблицы) полином Лагранжа $L_n(x)$ может быть записан в виде *интерполяционного полинома Ньютона* [1]

$$P_n(x) = y_0 + \frac{\Delta y_0}{h}(x-x_0) + \frac{\Delta^2 y_0}{2!h^2}(x-x_0)(x-x_1) + \dots + \frac{\Delta^n y_0}{n!h^n}(x-x_0)\cdots(x-x_n), \quad (6.5)$$

где

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta y_i = f(x_{i+1}) - f(x_i), \\ \Delta^2 y_i = \Delta y_{i+1} - \Delta y_i, \\ \dots\dots\dots \\ \Delta^n y_i = \Delta^{n-1} y_{i+1} - \Delta^{n-1} y_i, \\ (i = 0, 1, 2, \dots, n-1) \end{array} \right. \quad (6.6)$$

конечные разности различных порядков.

Задача *интерполирования функций* заключается в отыскании их нетабличных значений, т.е. $f(x) \neq f(x_i)$, с использованием интерполяционных полиномов.

В некоторых частных случаях при равноотстоящих узлах интерполяции с использованием (6.5) получаем:

- формула *линейного интерполирования* ($n = 1$):

$$y \approx y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h}(x - x_0), \quad (6.7)$$

- формула квадратичного интерполирования ($n = 2$):

$$y \approx y_0 + \frac{y_1 - y_0}{h}(x - x_0) + \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{2h^2}(x - x_0)(x - x_1), \quad (6.8)$$

Пример 1. Построить интерполяционный полином, совпадающий с функцией $f(x) = 3^x$, $x \in [-1, 1]$ в точках $x_0 = -1$, $x_1 = 0$, $x_2 = 1$.

Решение: искомый полином имеет вид $L(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2$. Для определения коэффициентов a_i имеем систему линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} a_0 - a_1 + a_2 = 1/3, & a_0 = 1 \\ a_0 = 1, & \text{откуда получаем } a_1 = 4/3 \\ a_0 + a_1 + a_2 = 3. & a_2 = 2/3 \end{cases}$$

В результате окончательно будем иметь

$$3^x \approx 1 + 4x/3 + 2x^2/3.$$

Пример 2. Используя интерполяционный полином Ньютона, вычислить $f(0,14)$, где $y = f(x)$ задана таблицей

x	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5
y	0	0,1002	0,2013	0,3045	0,4108	0,5211

Решение: составляем таблицу конечных разностей

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	$\Delta^5 y$
0	0	0,1002	0,0009	0,0012	-0,0002	0,0001
0,1	0,1002	0,1011	0,0021	0,0010	-0,0001	
0,2	0,2013	0,1032	0,0031	0,0009		
0,3	0,3045	0,1063	0,0040			
0,4	0,4108	0,1103				
0,5	0,5211					

Запишем интерполяционный полином Ньютона, полагая $x_0 = 0,1$; $h = 0,1$, в виде

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

где $q = (x - x_0)/h = (0,14 - 0,1)/0,1 = 0,4$.

Далее будем иметь:

$$\begin{aligned} f(0,14) &\approx 0,1002 + 0,1011 \cdot 0,4 + \frac{0,0021}{2} \cdot 0,4 \cdot (-0,6) + \\ &+ \frac{0,0010}{3!} \cdot 0,4 \cdot (-0,6) \cdot (-1,6) \approx 0,000064 + 0,04044 + \\ &+ 0,1002 - 0,000252 = 0,140452. \end{aligned}$$

Погрешность приближения равна:

$$\begin{aligned} R_4 &= |f(0,14) - P_3(0,14)| < \frac{0,0001}{4!} \cdot 0,4 \cdot 0,6 \cdot 1,6 \cdot 2,6 = \\ &= 4,16 \cdot 10^{-6} < 0,5 \cdot 10^{-5}. \end{aligned}$$

Сплайн - интерполяция.

Прежде всего введем понятие *многоинтервальной интерполяции*, заключающейся в интерполяции $y_i(x_i)$ в ряде частичных интервалов (ограниченных двумя узлами или группой узлов) отдельными полиномами не высокой степени. Такая интерполяция может применяться при широком общем отрезке $[a, b]$, когда обычная интерполяция полиномом высокой степени дает большую погрешность и требует длительных вычислений.

Сплайн - интерполяция есть вид многоинтервальной интерполяции, при котором интерполирующий полином обеспечивает не только равенство $y(x)$ значениям y_i в узлах, но и непрерывность заданного числа первых производных на границах частичных интервалов. Далее будет рассмотрен только случай построения *кубического сплайна* [1,3-5].

Кубический сплайн - это интерполирующая функция в виде полинома третьей степени, вычисляемая по формулам:

$$\left\{ \begin{array}{l} i = \text{int}\left(\frac{x-a}{h}\right), \\ y(x) = \frac{(x_{i+1}-x)^2(2\cdot(x-x_i)+h)}{h^3} \cdot y_i + \frac{(x-x_i)^2(2\cdot(x_{i+1}-x)+h)}{h^3} \cdot y_{i+1} + \\ + \frac{(x_{i+1}-x)^2(x-x_i)}{h^2} \cdot m_i - \frac{(x-x_i)^2(x-x_{i+1})}{h^2} \cdot m_{i+1}, \end{array} \right. \quad (6.9)$$

где m_i, m_{i+1} - первые производные локального сплайна $y(x)$. Они могут быть вычислены с помощью формул численного дифференцирования по трем точкам

$$\left\{ \begin{array}{l} m_i = (y_{i+1} - y_{i-1})/2h, \quad i = 1, 2, 3, \dots, n-1; \\ m_0 = (4y_1 - y_2 - 3y_0)/2h, \quad i = 0; \\ m_n = (3y_n + y_{n-2} - 4y_{n-1})/2h, \quad i = n. \end{array} \right. \quad (6.10)$$

Интерполяция функции двух переменных.

Интерполяция функции двух переменных по шести точкам (рис.2) выполняется по формулам

$$\begin{aligned} f(x, y) = & \frac{q(q-1)}{2} f_{0,-1} + \frac{p(p-1)}{2} f_{-1,0} + \\ & + (1 + p \cdot q - p^2 - q^2) f_{0,0} + \frac{p(p-2q+1)}{2} f_{1,0} + \frac{q(q-2p+1)}{2} f_{0,1} + p \cdot q \cdot f_{1,1}, \end{aligned} \quad (6.11)$$

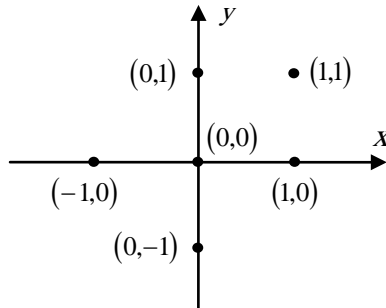


Рис.2.

где $p = (x - x_0)/h$, $q = (y - y_0)/l$. Здесь h и l - шаги изменения x и y соответственно. При интерполировании по шести точкам погрешность пропорциональна h^3 .

Провести интерполяцию кубическим сплайном вольт-амперной характеристики туннельного диода

$x_i; U, В$	0	0,1	0,2	0,3	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8
$y_i; I, мА$	0	10	4	2	1,5	2	5	9	13

7. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ

Рассмотрим способы приближенного вычисления определенных интегралов

$$I = \int_a^b f(x) dx, \quad (7.1)$$

основанные на замене интеграла конечной суммой

$$I_n = \sum_{k=0}^n c_k f(x_k), \quad (7.2)$$

где c_k - числовые коэффициенты и x_k - точки отрезка $[a, b]$, $k = 0, 1, 2, \dots, n$. Приближенное равенство

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{k=0}^n c_k f(x_k) \quad (7.3)$$

называется *квадратурной формулой*, а сумма вида (7.2) - *квадратурной суммой*. Точки x_k называются *узлами квадратурной формулы*, а числа c_k - *коэффициентами квадратурной формулы*. Разность

$$\Psi_n = \int_a^b f(x) dx - \sum_{k=0}^n c_k f(x_k) \quad (7.4)$$

называется *погрешностью квадратурной формулы*. Погрешность зависит как от расположения узлов, так и от выбора коэффициентов.

Пусть на отрезке $[a, b]$ определена равномерная сетка

$$\omega_h = \{x_i = a + i \cdot h, i = 0, 1, 2, \dots, N; hN = b - a\}. \quad (7.5)$$

Представим интеграл (7.1) в виде суммы интегралов по частичным отрезкам [1,3]

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=1}^N \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx. \quad (7.6)$$

Для построения формулы численного интегрирования на всем отрезке $[a, b]$ достаточно построить квадратурную формулу для интеграла

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \quad (7.7)$$

на частичном отрезке $[x_{i-1}, x_i]$ и воспользоваться свойством (7.6).

Метод прямоугольников.

Заменим интеграл (7.7) выражением $f(x_{i-1/2})h$, где $x_{i-1/2} = x_i - 0.5 \cdot h$. Геометрический смысл такой замены состоит в следующем. Площадь криволинейной трапеции $ABCD$ заменяется площадью прямоугольника $ABC'D'$ (рис.3).

В результате получаем формулу прямоугольников на частичном отрезке $[X_{i-1}, X_i]$ [1-4]

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx f(x_{i-1/2}) \cdot h. \quad (7.8)$$

Погрешность метода (7.8) может быть оценена исходя из формулы Тейлора для разложения функции $f(x)$ в окрестности точки $x_{i-1/2}$:

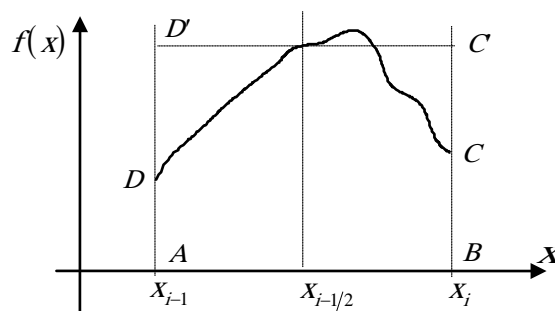


Рис.3.

$$\Psi_i = \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{(x - x_{i-1/2})^2}{2} f''(\zeta_i) dx, \quad (7.9)$$

где $\zeta_i \in [x_{i-1}, x_i]$. Обозначив $M_2^i = \max_{x \in [x_{i-1}, x_i]} |f''(x)|$, получаем окончательное выражение для оценки погрешности формулы (7.8) [1]

$$|\Psi_i| \leq \frac{h^3}{24} M_2^i, \quad (7.10)$$

т.е. формула имеет погрешность $O(h^3)$ при $h \rightarrow 0$.

Суммируя равенства (7.8) по i от 1 до N , получим составную формулу прямоугольников [1]

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N f(x_{i-1/2}) \cdot h. \quad (7.11)$$

Погрешность данной формулы равна сумме погрешностей по всем частичным отрезкам

$$|\Psi| \leq \frac{M_2 N h^3}{24} = \frac{h^2 (b-a)}{24} M_2, \quad (7.12)$$

где $M_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|$. Таким образом, погрешность формулы прямоугольников на всем отрезке интегрирования есть малая величина, пропорциональная h^2 при $h \rightarrow 0$.

Метод трапеций.

На частичном отрезке формула трапеций имеет вид

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \cdot h \quad (7.13)$$

и получается путем замены подынтегральной функции $f(x)$ интерполяционным полиномом Лагранжа первой степени, построенным на узлах x_{i-1}, x_i , т.е. линейной функцией вида

$$L_{1,i} = \frac{(x - x_{i-1}) f(x_i) - (x - x_i) f(x_{i-1})}{h}. \quad (7.14)$$

Для оценки погрешности достаточно вычислить интеграл

$$\begin{aligned} \Psi_i &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx - \frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2} \cdot h = \int_{x_{i-1}}^{x_i} (f(x) - L_{1,i}(x)) dx = \\ &= \int_{x_{i-1}}^{x_i} \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{2} f''(\zeta_i) dx. \end{aligned} \quad (7.15)$$

В результате получим оценку погрешности на частичном отрезке [1]

$$|\Psi_i| \leq \frac{M_2 \cdot h^3}{12}, \quad (7.16)$$

где $M_2^i = \max_{\zeta_i \in [x_{i-1}, x_i]} |f''(\zeta_i)|$.

Составная формула трапеций имеет вид

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \frac{f(x_i) + f(x_{i-1}))}{2} \cdot h =$$

$$= h \cdot (0,5 \cdot f_0 + f_1 + \dots + f_{N-1} + 0,5 \cdot f_N). \quad (7.17)$$

Здесь $f_i = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \dots, N$; $hN = b - a$.

Погрешность данной формулы определяется как

$$|\Psi| \leq \frac{h^2(b-a)}{12} \cdot M_2, \quad \text{где } M_2 = \max_{x \in [a, b]} |f''(x)|. \quad (7.18)$$

Таким образом, формула трапеций имеет второй порядок точности, но ее погрешность оценивается величиной в два раза большей, чем у формулы прямоугольников.

Методы Ньютона - Котеса.

Формулами Ньютона - Котеса называются квадратурные формулы интерполяционного типа, построенные на равномерной сетке, т.е. сетке с постоянным шагом $x_k - x_{k-1} = h$. Различают два типа формул Ньютона - Котеса: формулы замкнутого типа и формулы открытого типа. В формулах замкнутого типа $x_0 = a$, $x_n = b$, а в формулах открытого типа хотя бы один из узлов x_0 или x_n не совпадает с соответствующей граничной точкой отрезка интегрирования $[a, b]$. Ограничимся в дальнейшем рассмотрением формул замкнутого типа. Например, при $n = 1$ получаем рассмотренный выше метод трапеций, а при $n = 2$ - метод Симпсона, или метод парабол.

Метод Симпсона (парабол).

Заменим подынтегральную функцию $f(x)$ на частичном отрезке интегрирования $[x_{i-1}, x_i]$ параболой, проходящей через точки

$(x_j, f(x_j))$, где $j = i-1, i-0,5, i$, то есть построим интерполяционный полином Лагранжа второй степени [1-3,9]:

$$f(x) \approx L_2^i(x) = \frac{2}{h^2} \left((x-x_{i-1/2})(x-x_i) \cdot f_{i-1} - 2(x-x_{i-1})(x-x_i) \cdot f_{i-1/2} + (x-x_i)(x-x_{i-1/2}) \cdot f_i \right). \quad (7.19)$$

Проводя интегрирование, приходим к приближенному равенству

$$\int_{x_{i-1}}^{x_i} f(x) dx \approx \int_{x_{i-1}}^{x_i} L_2^i(x) dx = \frac{h}{6} (f_{i-1} + 4f_{i-1/2} + f_i), \quad (7.20)$$

называемому *формулой Симпсона (формулой парабол)*.

Составная формула Симпсона имеет вид

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{6} \sum_{i=1}^N (f_{i-1} + 4f_{i-1/2} + f_i) = \frac{h}{6} [f_0 + f_N + 2(f_1 + \dots + f_{N-1}) + 4(f_{1/2} + \dots + f_{N-1/2})]. \quad (7.21)$$

Для погрешности квадратурной суммы в методе Симпсона справедлива оценка

$$|\Psi| \leq \frac{h^4(b-a)}{2880} M_4, \quad \text{где } M_4 = \max_{x \in (a,b)} |f^{IV}(x)|, \quad hN = b-a. \quad (7.22)$$

Выражение для остаточного члена (7.22) показывает, что формула Симпсона точна, даже если $f(x)$ является многочленом третьей степени. При этом ошибка, допущенная при численном интегрировании будет малой величиной порядка h^4 при шаге $h \rightarrow 0$.

Метод Гаусса - Кристоффеля.

Метод основан на интерполяции $f(x)$ полиномом Лагранжа, но абсциссы x_j выбираются из условия обеспечения минимума погрешности интерполяции. Можно показать [5], что в данном случае узлами квадратурной суммы с N слагаемыми должны быть нули многочленов

соответствующей степени $P_N(x)$, ортогональных на отрезке интегрирования $[a, b]$ (в общем случае с некоторой весовой функцией $\rho(x) > 0$, непрерывной на интервале (a, b)).

В методе Гаусса - Кристоффеля интеграл (7.1) с помощью замены переменной

$$x = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot t \quad (7.23)$$

сводится к виду

$$I = \int_{-1}^1 f(t) dt \approx \sum_{i=1}^N c_i f(x_i). \quad (7.24)$$

Далее находят узлы квадратурной суммы (7.24) по описанному выше правилу и вычисляют интеграл.

При весовой функции $\rho(x) = 1$ ортогональными полиномами на отрезке $[-1, 1]$ могут быть полиномы Лежандра, которые вычисляются по формуле Родригеса:

$$P_N(x) = \frac{1}{2^N N!} \frac{d^N}{dx^N} (x^2 - 1)^N. \quad (7.25)$$

Верхняя граница погрешности формулы Гаусса - Кристоффеля (7.24) может быть оценена как [5]

$$\max |\Psi| \approx \frac{b-a}{2,5\sqrt{N}} \left(\frac{b-a}{3N} \right)^{2N} \cdot M_{2N}, \quad (7.26)$$

где $M_{2N} = \max_{x \in [a, b]} |f^{(2N)}(x)|$. Таким образом, метод Гаусса - Кристоффеля обеспечивает повышенную точность численного интегрирования, причем для функций $f(x)$, - полиномов степени ниже $2N$, - формула Гаусса - Кристоффеля является точной.

Вычисление несобственных интегралов.

Сходящиеся несобственные интегралы с бесконечными пределами интегрирования вычисляются различными приемами. Так, интеграл вида

$$I = \int_a^{\infty} f(x) dx = \int_a^b f(x) dx + \int_b^{\infty} f(x) dx \quad (7.27)$$

может вычисляться как обыкновенный определенный интеграл (7.1) при выборе вспомогательного промежуточного предела интегрирования из условия

$$\int_b^{\infty} f(x) dx < \varepsilon, \quad (7.28)$$

где ε - заданная погрешность интегрирования.

Другой прием заключается в автоматическом изменении b , например, $b_0, 2b_0, 4b_0, \dots$, где b_0 - начальное значение b , с контролем на каждой i -ой стадии условия

$$|I_i - I_{i-1}| < \varepsilon. \quad (7.29)$$

При выполнении этого условия счет прекращается.

Методом Симпсона вычислить несобственный интеграл

$$\int_0^{\infty} x \cdot \exp(-x) dx$$

с точностью $\varepsilon = 0,001$.

8. РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ

При обработке экспериментальных результатов всегда встает вопрос об их приближении некоторой аналитической зависимостью. Одним из методов такого приближения является *метод наименьших квадратов* [4-6].

Линейный парный регрессионный анализ.

Пусть необходимо определить параметры эмпирической линейной зависимости

$$y(x) = b_1 x + b_0, \quad (8.1)$$

описывающей связь между некоторым числом N пар значений x_i и y_i , обеспечивая при этом наименьшую среднеквадратичную погрешность. Графически эту задачу можно представить следующим образом. В облаке точек (x_i, y_i) плоскости xOy требуется провести прямую так, чтобы величина всех отклонений отвечала условию

$$U = \sum_{i=1}^N [y_i - y(x_i)]^2 = \min, \quad (8.2)$$

где $y(x_i)$ есть зависимость (8.1). Для этого приравняем нулю частные производные

$$\begin{cases} \frac{\partial U}{\partial b_0} = -2 \sum_{i=1}^N [y_i - (b_1 x_i + b_0)] = 0, \\ \frac{\partial U}{\partial b_1} = -2 \sum_{i=1}^N [y_i - (b_1 x_i + b_0)] x_i = 0, \end{cases} \quad (8.3)$$

что дает для определения неизвестных коэффициентов b_0 и b_1 систему линейных уравнений

$$\begin{cases} b_0 N + b_1 \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_i + b_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N x_i y_i. \end{cases} \quad (8.4)$$

Решение системы уравнений (8.4) имеет вид

$$\left\{ \begin{array}{l} b_1 = \frac{\sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N y_i - N \sum_{i=1}^N x_i y_i}{\left(\sum_{i=1}^N x_i \right)^2 - N \sum_{i=1}^N x_i^2}, \\ b_0 = \frac{1}{N} \left(\sum_{i=1}^N y_i - b_1 \sum_{i=1}^N x_i \right). \end{array} \right. \quad (8.5)$$

При необходимости количественной оценки степени приближения можно вычислить величину среднего квадратичного отклонения σ :

$$\sigma^2 = \frac{1}{N} \left[\sum_{i=1}^N y_i^2 - b_1 \sum_{i=1}^N y_i - b_0 \sum_{i=1}^N x_i y_i \right]. \quad (8.6)$$

Гиперболическая регрессия.

заключается в нахождении параметров функции

$$y(x) = b_0 + \frac{b_1}{x} \quad (8.7)$$

из решения системы уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} b_0 N + b_1 \sum_{i=1}^N 1/x_i = \sum_{i=1}^N y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^N 1/x_i + b_1 \sum_{i=1}^N 1/x_i^2 = \sum_{i=1}^N y_i/x_i. \end{array} \right. \quad (8.8)$$

Степенная регрессия.

обеспечивает нахождение параметров функции

$$y = b_0 x^h \quad (8.9)$$

по формулам

$$\begin{cases} b_1 = \frac{\sum_{i=1}^N \ln x_i \sum_{i=1}^N \ln y_i - N \sum_{i=1}^N \ln x_i \ln y_i}{\left(\sum_{i=1}^N \ln x_i\right)^2 - N \sum_{i=1}^N \ln^2 x_i}, \\ b_0 = \exp\left[\frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^N \ln y_i - b_1 \sum_{i=1}^N \ln x_i\right)\right]. \end{cases} \quad (8.10)$$

Показательная регрессия.

обеспечивает получение параметров a и b показательной функции

$$y(x) = a \cdot b^x \quad (8.11)$$

из решения системы уравнений

$$\begin{cases} N \lg a + \lg b \sum_{i=1}^N x_i = \sum_{i=1}^N \lg y_i, \\ \lg a \sum_{i=1}^N x_i + \lg b \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N x_i \lg y_i. \end{cases} \quad (8.12)$$

Экспоненциальная регрессия.

заключается в нахождении параметров функции

$$y(x) = b_0 \exp(b_1 x) \quad (8.13)$$

по формулам

$$\begin{cases} b_1 = \frac{\sum_{i=1}^N x_i \sum_{i=1}^N \ln y_i - N \sum_{i=1}^N x_i \ln y_i}{\left(\sum_{i=1}^N x_i\right)^2 - N \sum_{i=1}^N x_i^2}, \\ b_0 = \exp\left[\frac{1}{N}\left(\sum_{i=1}^N \ln y_i - b_1 \sum_{i=1}^N x_i\right)\right]. \end{cases} \quad (8.14)$$

Логарифмическая регрессия.

дает параметры a и b функции

$$y(x) = a + b \lg x \quad (8.15)$$

из решения системы уравнений

$$\begin{cases} aN + b \sum_{i=1}^N \lg x_i = \sum_{i=1}^N y_i, \\ a \sum_{i=1}^N \lg x_i + b \sum_{i=1}^N \lg^2 x_i = \sum_{i=1}^N y_i \lg x_i. \end{cases} \quad (8.16)$$

Параболическая регрессия.

обеспечивает получение трех параметров b_0, b_1, b_2 приближения параболической функцией

$$y(x) = b_0 + b_1 x + b_2 x^2 \quad (8.17)$$

из решения системы трех уравнений

$$\begin{cases} b_0 N + b_1 \sum_{i=1}^N x_i + b_2 \sum_{i=1}^N x_i^2 = \sum_{i=1}^N y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_i + b_1 \sum_{i=1}^N x_i^2 + b_2 \sum_{i=1}^N x_i^3 = \sum_{i=1}^N x_i y_i, \\ b_0 \sum_{i=1}^N x_i^2 + b_1 \sum_{i=1}^N x_i^3 + b_2 \sum_{i=1}^N x_i^4 = \sum_{i=1}^N x_i^2 y_i. \end{cases} \quad (8.18)$$

Полиномиальная регрессия.

обеспечивает нахождение коэффициентов полинома

$$y(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \dots + a_m x^m \quad (8.19)$$

из решения системы уравнений

$$\begin{cases} c_0 a_0 + c_1 a_1 + \dots + c_m a_m = d_0, \\ c_1 a_0 + c_2 a_1 + \dots + c_{m+1} a_m = d_1, \\ \dots\dots\dots \\ c_m a_0 + c_{m+1} a_1 + \dots + c_{2m} a_m = d_m, \end{cases} \quad (8.20)$$

где

$$c_j = \sum_{i=1}^N x_i^j, \quad j = 0, 1, 2, 3, \dots, 2m \quad (8.21)$$

$$d_k = \sum_{i=1}^N x_i^k y_i, \quad k = 0, 1, 2, 3, \dots, m. \quad (8.22)$$

Заметим, что полином степени $m < N$, где N - число пар x_i, y_i , обеспечивает аппроксимацию (и интерполяцию) таблично заданной функции $y_i(x_i)$ с минимальной среднеквадратичной погрешностью. Если $m = N$, то имеет место обычная интерполяция, т.е. значения $y(x)$ при $x = x_i$ точно совпадают с заданными y_i . При $m < N$ такого совпадения в общем случае нет. Таким образом, аппроксимация функции по методу наименьших квадратов имеет более универсальный характер, чем обычная интерполяция.

Вычислить параметры параболической регрессии для значений								
x_i	0	1	2	3	4	-1	-2	-3
y_i	-3,9	-2,2	3,9	14,3	27,7	-2,0	3,8	14,4

9. ВЫЧИСЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ МАТРИЦ

Основные понятия.

Если \hat{A} – квадратная матрица n -го порядка и $\hat{A}|x\rangle = \lambda|x\rangle$, $|x\rangle \neq 0$, то λ есть собственное значение матрицы \hat{A} , а ненулевой вектор $|x\rangle$ – собственный вектор. Перепишем уравнение на собственные значения в виде

$$(\hat{A} - \lambda\hat{E})|x\rangle = |0\rangle. \quad (9.1)$$

Для существования нетривиального решения задачи (9.1) должно выполняться условие

$$\det(\hat{A} - \lambda\hat{E}) = 0. \quad (9.2)$$

Уравнение (9.2) называется характеристическим уравнением; сам определитель есть многочлен n -ой степени относительно λ . Значит, существует n собственных значений – корней этого многочлена, среди которых могут быть кратные.

Если найдено собственное значение λ , то подставляя его в систему уравнений (9.1), можно определить соответствующий ему собственный вектор. Каждому простому λ соответствует один (с точностью до направления) собственный вектор, а совокупность всех собственных векторов является линейно-независимой. Эта система векторов может образовывать базис пространства. Если среди собственных значений матрицы есть кратные, то ее собственные векторы не всегда образуют базис. Однако, и в этом случае собственные векторы, отвечающие различным собственным значениям, являются линейно-независимыми.

Задача на собственные значения легко решается для некоторых простых форм матрицы: диагональной, трехдиагональной или треугольной. Собственные значения диагональной (треугольной) матрицы равны ее диагональным коэффициентам.

Многие численные методы решения задач на собственные значения основаны на приведении матрицы к одной из перечисленных форм при помощи преобразования подобия

$$\hat{G} = \hat{F}^{-1} \cdot \hat{A} \cdot \hat{F}.$$

Можно показать [5], что если λ и $|x\rangle$ - собственное значение и собственный вектор матрицы \hat{G} , то λ и $|\hat{F}x\rangle$ - собственное значение и собственный вектор матрицы \hat{A} . Таким образом, преобразование подобия не меняет спектра матрицы.

Замечания. 1). собственные значения эрмитово сопряженных матриц комплексно сопряжены друг другу;
 2). собственные значения эрмитовских матриц действительны;
 3). собственные векторы эрмитовских матриц, отвечающие различным собственным значениям, ортогональны друг другу.

Трехдиагональные матрицы.

Трехдиагональная матрица - это матрица, отличными от нуля элементами которой являются лишь элементы главной диагонали и двух соседних побочных диагоналей.

Пусть $D_m(\lambda)$ - главный минор m -го порядка трехдиагональной матрицы $\hat{A} - \lambda\hat{E}$. Разложим такой минор по элементам его последней строки (в ней всего два ненулевых элемента):

$$D_m(\lambda) = (a_{mm} - \lambda)D_{m-1}(\lambda) - a_{m,m-1}B_{m,m-1}(\lambda), \quad (9.3)$$

где $B_{m,m-1}(\lambda)$ - минор, дополняющий элемент $a_{m,m-1}$. Этот минор содержит в последнем столбце только один ненулевой элемент $a_{m-1,m}$.

$D_{m-2}(\lambda)$		0	0
		$a_{m-2,m-1}$	
0	$a_{m-1,m-2}$	$a_{m-1,m-1} - \lambda$	$a_{m-1,m}$
0		$a_{m,m-1}$	$a_{m,m} - \lambda$

Разложим $B_{m,m-1}(\lambda)$ по элементам последнего столбца:

$$B_{m,m-1}(\lambda) = a_{m-1,m} D_{m-2}(\lambda). \quad (9.4)$$

Подставляя (9.4) в (9.3), найдем рекуррентное соотношение

$$D_m(\lambda) - (a_{mm} - \lambda) D_{m-1}(\lambda) + a_{m,m-1} a_{m-1,m} D_{m-2}(\lambda) = 0. \quad (9.5)$$

Для начала расчета необходимо задать два первых минора. Удобно формально положить $D_{-1}(\lambda) = 0$, $D_0(\lambda) = 1$.

Таким образом, существует быстрый способ вычисления определителей трехдиагональных матриц n -го порядка, требующий $5n$ арифметических действий.

Далее необходимо численно найти корни многочлена $D_n(\lambda)$, применяя, например, метод Ньютона или метод парабол. Заметим, что при любом способе вычисления корней необходимо удалять полученные корни, переходя к вспомогательной функции

$$g(\lambda) = D_n(\lambda) / \prod_{i=1}^k (\lambda - \lambda_i)$$

и увеличивая точность вычисления последующего корня.

Трехдиагональные действительные симметричные (якобиевы) матрицы специального вида.

Рекуррентное соотношение (9.5) может быть разрешено аналитически относительно $D_m(\lambda)$ для случая действительных симметричных (якобиевых) трехдиагональных матриц специального вида:

$$\hat{A} = \begin{pmatrix} d & c & 0 & 0 & \dots & 0 \\ c & d & c & 0 & \dots & 0 \\ 0 & c & d & c & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & c & d & c \\ 0 & \dots & \dots & 0 & c & d \end{pmatrix}.$$

Заметим, что подобные матрицы описывают квантовую механику электрона в одномерном кристалле в приближении сильной связи (см., например, [11]).

Для указанных матриц становится возможным получение явного аналитического выражения для спектра ее собственных значений. Рекуррентное соотношение (9.5) запишется как

$$D_m(\lambda) - (d - \lambda)D_{m-1}(\lambda) + c^2 D_{m-2}(\lambda) = 0. \quad (9.6)$$

Решение уравнения (9.6) относительно $D_m(\lambda)$ будем искать в виде

$$D_m(\lambda) = \alpha \cdot q_1^m + \beta \cdot q_2^m, \quad (9.7)$$

где $q_{1,2}$ есть корни характеристического уравнения

$$q^2 - (d - \lambda)q + c^2 = 0, \quad (9.8)$$

определяемые формулой

$$\begin{aligned} q_{1,2} &= c \left[\frac{d - \lambda}{2c} \pm i \sqrt{1 - \frac{(d - \lambda)^2}{(2c)^2}} \right] = \\ &= c [\cos \varphi \pm i \sin \varphi]; \quad \cos \varphi = \frac{d - \lambda}{2c}. \end{aligned} \quad (9.9)$$

После подстановки (9.9) в (9.7) и определения констант α и β по двум характеристическим определителям $D_1(\lambda)$ и $D_2(\lambda)$ окончательно получим:

$$D_m(\lambda) = c^m \left[\cos m\varphi + \frac{\cos \varphi}{\sin \varphi} \cdot \sin m\varphi \right] = c^m \frac{\sin[(m+1)\varphi]}{\sin \varphi}. \quad (9.10)$$

Для того, чтобы $D_n(\lambda) = 0$, необходимо:

$$\sin[(n+1)\varphi] = 0.$$

Отсюда получаем

$$\varphi = \frac{\pi k}{n+1}; \quad \frac{d - \lambda}{2c} = \cos \frac{\pi k}{n+1}; \quad k = 1, 2, 3, \dots, n. \quad (9.11)$$

Окончательно, приходим к явной формуле

$$\lambda_k = d - 2c \cos \frac{\pi k}{n+1}; \quad (k = 1, 2, 3, \dots, n). \quad (9.12)$$

Все эти корни сосредоточены на интервале $d - 2c < \lambda < d + 2c$ и сгущаются к его краям.

Приведение действительной симметричной матрицы к трехдиагональному виду.

Рассмотрим преобразования векторов N -мерного пространства, осуществляемые путем ортогонального отражения относительно гиперплоскости

$$\langle p | x \rangle = p_1 x_1 + p_2 x_2 + \dots + p_N x_N = 0,$$

проходящей через начало координат и перпендикулярной вектору $|p\rangle$.

Если $|x\rangle = (x_1, \dots, x_N)^T$ не лежит в этой гиперплоскости, то вектор

$\frac{\langle p | x \rangle}{\langle p | p \rangle} \cdot |p\rangle$ есть вектор, перпендикулярный гиперплоскости, который

нужно вычесть из $|x\rangle$, чтобы разность принадлежала гиперплоскости.

Чтобы отразить $|x\rangle$ относительно гиперплоскости, нужно вычесть из него этот перпендикулярный вектор два раза:

$$|y\rangle = |x\rangle - 2 \frac{\langle p | x \rangle}{\langle p | p \rangle} \cdot |p\rangle.$$

В результате получаем отраженный вектор $|y\rangle$. Если к вектору $|y\rangle$ применить преобразование отражения, то получим вновь исходный вектор $|x\rangle$. Обозначая через \hat{P} линейное преобразование отражения, будем иметь:

$$|y\rangle = \hat{P}|x\rangle, \text{ при этом } \hat{P}^2 = \hat{E}.$$

Поскольку

$$y_i = x_i - \frac{2p_i}{p_1^2 + p_2^2 + \dots + p_N^2} \sum_{j=1}^N p_j x_j,$$

мы обязаны положить

$$P_{ij} = \delta_{ij} - 2p_i p_j / \langle p | p \rangle.$$

Видно, что \hat{P} симметрична ($P_{ij} = P_{ji}$) и ортогональна ($\hat{P}^T \hat{P} = \hat{P} \hat{P} = \hat{P}^2 = \hat{E}$). Сам вектор отражения $|p\rangle$, задающий матрицу отражения \hat{P} , удобнее нормировать на 2.

Пусть $\hat{A} = \hat{C}^{(0)}$ – симметричная матрица порядка N :

$$\hat{C}^{(0)} = \begin{pmatrix} c_{11}^{(0)} & c_{12}^{(0)} & \dots & c_{1N}^{(0)} \\ c_{21}^{(0)} & c_{22}^{(0)} & \dots & c_{2N}^{(0)} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ c_{M1}^{(0)} & c_{N2}^{(0)} & \dots & c_{MN}^{(0)} \end{pmatrix}, \quad c_{ij}^{(0)} = c_{ji}^{(0)}. \quad (9.13)$$

Определим отображение $\hat{P}^{(1)}$, выбрав задающий его вектор $|p\rangle$ при помощи формул:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma^{(1)} = \begin{cases} +1, & c_{21}^{(0)} \geq 0, \\ -1, & c_{21}^{(0)} < 0, \end{cases} \\ p_1 = 0, \quad p_2 = c_{21}^{(0)} + \sigma^{(1)} \sqrt{[c_{21}^{(0)}]^2 + [c_{31}^{(0)}]^2 + \dots + [c_{M1}^{(0)}]^2}, \\ p_j = c_{j1}^{(0)}, \quad j = 3, 4, \dots, N. \end{array} \right. \quad (9.14)$$

В этом случае

$$\langle p | p \rangle = 2 |p_2| \sqrt{[c_{21}^{(0)}]^2 + \dots + [c_{M1}^{(0)}]^2}.$$

Из формулы, описывающей преобразование отражения

$$y_i = x_i - \sum_{j=1}^N \frac{2 p_i p_j}{\langle p | p \rangle} x_j \quad (9.15)$$

видно, что из $p_1 = 0$ следует совпадение $y_1 = x_1$ первых компонент отраженного и отражаемого векторов. Следовательно, $\hat{C}^{(0)}$ и $\hat{P}^{(1)} \hat{C}^{(0)}$ имеют одинаковую первую строку. Кроме того, можно показать, что

$$\left. \begin{aligned} \hat{P}^{(1)} \begin{pmatrix} c_{11}^{(0)} \\ c_{21}^{(0)} \\ c_{31}^{(0)} \\ \vdots \\ c_{M1}^{(0)} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c_{11}^{(0)} \\ c_{11}^{(1)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \\ c_{21}^{(1)} &= -\sigma^{(1)} \sqrt{[c_{21}^{(0)}]^2 + \dots + [c_{M1}^{(0)}]^2}. \end{aligned} \right\} \quad (9.16)$$

Теперь очевидно, что $\hat{C}^{(1)} = \hat{P}^{(1)} \hat{C}^{(0)}$ имеет структуру

$$\hat{C}^{(1)} = \begin{pmatrix} \times & \times & \times & \cdots & \times \\ \times & \times & \times & \cdots & \times \\ 0 & \times & \times & \cdots & \times \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \times & \times & \cdots & \times \end{pmatrix}. \quad (9.17)$$

Построим $\hat{C}^{(2)}$, умножив $\hat{C}^{(1)}$ на $\hat{P}^{(1)}$ справа: $\hat{C}^{(2)} = \hat{C}^{(1)} \hat{P}^{(1)}$. При этом первый столбец $\hat{C}^{(1)}$ останется без изменения, и $\hat{C}^{(2)}$ обладает структурой (9.17). С другой стороны,

$$\hat{C}^{(2)} = \hat{P}^{(1)} \hat{C}^{(0)} \hat{P}^{(1)},$$

$$[\hat{C}^{(2)}]^T = [\hat{P}^{(1)}]^T [\hat{C}^{(0)}]^T [\hat{P}^{(1)}]^T = \hat{C}^{(2)},$$

т.е. $\hat{C}^{(2)}$ – симметрична, и ее структура обязана быть следующего вида:

$$\hat{C}^{(2)} = \begin{pmatrix} \times & \times & 0 & \cdots & 0 \\ \times & \times & \times & \cdots & \times \\ 0 & \times & \times & \cdots & \times \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & \times & \times & \cdots & \times \end{pmatrix}. \quad (9.18)$$

Кроме того, можно вывести, что

$$\begin{cases} c_{11}^{(2)} = c_{11}^{(0)}, \\ c_{12}^{(2)} = c_{21}^{(2)} = -\sigma^{(1)} \sqrt{[c_{21}^{(0)}]^2 + \dots + [c_{M1}^{(0)}]^2}. \end{cases}$$

Далее по аналогичным правилам строятся отображения $\hat{P}^{(2)}, \hat{P}^{(3)}, \dots, \hat{P}^{(N-2)}$ и преобразованные матрицы

$$\hat{C}^{(2j+2)} = \hat{P}^{(j+1)} \hat{C}^{(2j)} \hat{P}^{(j+1)},$$

причем $\hat{C}^{(2j)}$ имеют структуру

$$\hat{C}^{(2j)} = \begin{pmatrix} \times & \times & & & & & & & & \\ \times & \times & \times & & & & & & & \\ & \times & \times & \times & & & & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & & & & \\ & & & & \times & \times & \times & 0 & \dots & \dots & 0 \\ \hline & & & & \times & & & & & & \\ & & & & 0 & & & & & & \\ & 0 & & & \vdots & & & \times & & & \\ & & & & \vdots & & & & & & \\ & & & & 0 & & & & & & \end{pmatrix}, \quad (9.19)$$

где отличные от нуля матричные элементы первых j строк и j столбцов расположены в трех указанных диагоналях.

Вектор $|p\rangle$ гиперплоскости, отражение относительно которой обозначается $\hat{P}^{(j+1)}$, определяется компонентами:

$$\left. \begin{aligned} \sigma^{(j+1)} &= \begin{cases} +1, & c_{j+2,j+1}^{(2,j)} \geq 0, \\ -1, & c_{j+2,j+1}^{(2,j)} < 0, \end{cases} \\ p_1 = p_2 = \dots = p_j = p_{j+1} &= 0, \\ p_{j+2} &= c_{j+2,j+1}^{(2,j)} + \sigma^{(j+1)} \sqrt{[c_{j+2,j+1}^{(2,j)}]^2 + \dots + [c_{N,j+1}^{(2,j)}]^2}, \\ p_k &= c_{k,j+1}^{(2,j)}, \quad k = j+3, j+4, \dots, N. \end{aligned} \right\} \quad (9.20)$$

Таким образом, последняя из полученных матриц $\hat{C}^{(2N-4)}$ имеет трехдиагональный вид

$$\hat{C}^{(2N-4)} = \begin{pmatrix} \times & \times & & & \\ \times & \times & \times & & 0 \\ & \times & \times & \times & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & & & \times & \times & \times \\ & & & & \times & \times \end{pmatrix} \quad (9.21)$$

и те же собственные значения, что и матрица $\hat{A} = \hat{C}^{(0)}$, поскольку связана с ней преобразованием подобия.

Вычисление собственного вектора.

Если собственное значение известно, то собственный вектор удовлетворяет системе уравнений (9.1). Но любой численный метод дает вместо точного собственного значения λ_i приближенное значение $\tilde{\lambda}_i$, так что $\det(\hat{A} - \tilde{\lambda}_i \hat{E}) \neq 0$, хотя и отличается от нуля мало. В данном случае задача $(\hat{A} - \tilde{\lambda}_i \hat{E})|x\rangle = |0\rangle$ при использовании приближенного собственного значения имеет только тривиальное решение $|x\rangle = 0$. Поэтому в численных расчетах находить собственный вектор непосредственно из системы (9.1) нельзя.

Для нахождения собственного вектора удобен *метод обратных итераций*.

Выберем наугад вектор $|b\rangle$ и рассмотрим неоднородную систему

$$(\hat{A} - \tilde{\lambda}_i \hat{E})|x\rangle = |b\rangle. \quad (9.22)$$

Определитель этой системы отличен от нуля, так что она имеет единственное решение. Покажем, что найденный из нее вектор $|x\rangle$ окажется почти равным собственному вектору $|x_i\rangle$, соответствующему собственному значению λ_i .

Пусть матрица n -го порядка имеет n линейно-независимых собственных векторов $|x_j\rangle$. Тогда собственные векторы образуют базис, по которому можно разложить $|x\rangle$ и $|b\rangle$:

$$|x\rangle = \sum_{j=1}^n \xi_j |x_j\rangle; \quad |b\rangle = \sum_{j=1}^n \beta_j |x_j\rangle. \quad (9.23)$$

Подставляем (9.23) в систему (9.22). В результате получим:

$$\sum_{j=1}^n [\xi_j (\lambda_j - \tilde{\lambda}_i) - \beta_j] |x_j\rangle = |0\rangle.$$

Поскольку векторы $|x_j\rangle$ линейно-независимы, то

$$\xi_j = \frac{\beta_j}{\lambda_j - \tilde{\lambda}_i}. \quad (9.24)$$

Видно, что при $\lambda_j \approx \tilde{\lambda}_i$ коэффициент ξ_j в (9.23) будет очень большим.

- Если собственное значение λ_i простое, то только один из коэффициентов ξ_j оказывается очень большим, а именно, ξ_i . Это означает, что найденный вектор $|x\rangle$ почти совпадает с собственным вектором $|x_i\rangle$ (с точностью до нормировки). Чем точнее найдено $\tilde{\lambda}_i$ (хорошая точность особенно важна для близких собственных значений),

тем ближе $|x\rangle$ будет к $|x_i\rangle$. Если собственные значения найдены грубо или вектор $|b\rangle$ выбран неудачно¹, так что β_i мало, то разница между $|x\rangle$ и $|x_i\rangle$ может оказаться заметной. В данном случае для уточнения $|x_i\rangle$ используют итерационный процесс

$$(\hat{A} - \tilde{\lambda}_i \hat{E})|x^{(s)}\rangle = |x^{(s-1)}\rangle, \quad |x^{(0)}\rangle = |b\rangle. \quad (9.25)$$

Обычно он сходится к $|x_i\rangle$ за 2 - 3 итерации. На каждой итерации необходимо проводить нормировку $|x^{(s)}\rangle$.

- Если собственное значение λ_i кратно (кратность равна p), то линейная комбинация собственных векторов $|x_1\rangle, \dots, |x_p\rangle$ будет собственным вектором матрицы \hat{A} с тем же собственным значением. Тогда из (9.24) следует, что большими оказываются коэффициенты ξ_1, \dots, ξ_p (степень их усиления одинакова). Значит, найденный из (9.22) вектор $|x\rangle$ будет приближенно линейной комбинацией $|x_1\rangle, \dots, |x_p\rangle$, а тем самым, искомым собственным вектором. Если точность приближения недостаточна, то обратную итерацию (9.25) можно повторить. Чтобы найти все собственные векторы для кратного собственного значения, нужно взять столько линейно-независимых векторов $|b^{(k)}\rangle$, какова кратность корня. Обратными итерациями получим столько же искомым векторов $|x^{(k)}\rangle$. В данном случае наиболее удачным будет такой выбор векторов $|b^{(k)}\rangle$, при котором все их компоненты являются многозначными случайными числами.

¹ Наиболее эффективным является такой выбор вектора $|b\rangle$, при котором все его компоненты в декартовых координатах равны единице.

Вопросы устойчивости и точности рассмотренных выше методов решения задачи на собственные значения и собственные векторы матриц подробно рассмотрены в [5,12].

10. ПОИСК ЭКСТРЕМУМОВ ФУНКЦИЙ ОДНОЙ И МНОЖЕСТВА ПЕРЕМЕННЫХ

На практике часто необходимо найти экстремум (или экстремумы некоторой функции $F(x_1, x_2, \dots, x_n)$ n переменных x_i (проектных параметров). В общем случае функция $F(x)$ может иметь несколько экстремумов. Из них главный (оптимальное решение для пространства проектирования) называется глобальным. **Задача поиска экстремумов сводится к их локализации и уточнению значений x и $F(x)$ в точке экстремума.** В дальнейшем для функций одной переменной под экстремумом будем подразумевать максимум $F(x)$. При этом следует заметить, что максимуму функции $F(x)$ соответствует минимум функции $-F(x)$. Будем также полагать, что на изменения x накладываются ограничения в виде неравенства $a \leq x \leq b$, где a и b — границы интервала поиска. В пределах отрезка $[a, b]$ функцию считаем унимодальной, т.е. содержащей один максимум.

Метод равномерного поиска.

Метод основан на том, что переменной x присваиваются значения $x + \Delta x$ с постоянным шагом $\Delta x = const$ и вычисляются значения $F(x)$. Если $F(x_{n+1}) > F(x_n)$, переменной x дается новое приращение. Как только $F(x_{n+1})$ станет меньше $F(x_n)$, поиск останавливается. При малой заданной погрешности этот метод неэкономичен по затратам машинного времени.

Метод поразрядного приближения

является разновидностью метода равномерного поиска и реализуется следующим алгоритмом:

1. Задаем начальное приближение $x = x_0$ слева от максимума $F(x)$ и вычисляем $F(x_0)$. Задаем $D = h = \Delta x$ – начальный шаг поиска.
2. Полагаем $G = F(x_n)$, где вначале $F(x_n) = F(x_0)$, задаем $x = x + D$ и вычисляем $F(x_{n+1}) = F(x)$.
3. Проверяем условие $F(x_{n+1}) > G$; если оно выполняется, идем к п.2, если нет – к п.4.
4. Полагаем $D = -D/4$. Проверяем условие $|D| > \varepsilon/4$, где ε – заданная погрешность вычисления x_m в точке максимума. Если оно выполняется, идем к п.2, то есть обеспечиваем поиск максимума в обратном направлении с шагом в 4 раза меньше прежнего. Если данное условие не выполняется, заканчиваем счет.

Метод «золотого сечения»

основан на делении отрезка $[a, b]$ по правилу «золотого сечения»: отношение длины большей части отрезка к длине меньшей равно отношению длины всего отрезка $[a, b]$ к длине большей части. Данный метод реализуется следующим алгоритмом:

1. Находим коэффициент дробления $k = (\sqrt{5} - 1)/2$ отрезка $[a, b]$.
2. Находим абсциссу $x_1 = a + (1 - k)(b - a)$ и вычисляем $F(x_1)$.
3. Находим абсциссу $x_2 = a + k \cdot (b - a)$ и вычисляем $F(x_2)$.
4. Проверяем выполнение условия $|x_2 - x_1| < \varepsilon$, где ε – заданная погрешность вычисления x_m . Если это условие выполняется, вычисляем $x_m = (x_1 + x_2)/2$ и $F(x_m)$, после чего останавливаем счет с вы-

дачей полученных значений x_m и $F(x_m)$. Если данное условие не выполняется, идем к п.5.

5. Проверяем условие $F(x_1) < F(x_2)$. Если оно выполняется, полагаем $a = x_1$, $x_1 = x_2$ и $F(x_1) = F(x_2)$, после чего выполняем п.3 и п.4.
6. Если $F(x_1) \geq F(x_2)$, полагаем $b = x_2$, $x_2 = x_1$, $F(x_2) = F(x_1)$, после чего выполняем п.2 и п.4.

Метод квадратичной интерполяции-экстраполяции

заключается в замене $F(x)$ в промежутке $x_1 \pm h$, где x_1 – начальное приближение к x_m , квадратичной параболой, экстремум которой вычисляется аналитически. После приближенного нахождения экстремума \bar{x}_m можно задать $x_1 = \bar{x}_m$ и повторить поиск. Таким образом, с помощью итерационной процедуры значение x_m уточняется до получения его с заданной точностью ε . Алгоритм реализации этого метода следующий.

1. Задаем начальное приближение x_1 для x_m и вычисляем два смежных значения аргумента $F(x)$: $x_0 = x_1 - h$ и $x_2 = x_1 + h$, где h – полуинтервал интерполяции - экстраполяции.
2. Вычисляем три значения $F(x)$: $F(x_0) = F_0$, $F(x_1) = F_1$, $F(x_2) = F_2$.
3. Находим коэффициенты

$$c = \frac{F_0}{2h^2} - \frac{F_1}{h^2} + \frac{F_2}{2h^2} = \frac{1}{2h^2}(F_0 - 2F_1 + F_2),$$

$$b = \frac{-F_0(2x_1 + h) + 4F_1x_1 - F_2(2x_1 - h)}{2h^4}.$$

параболы $y(x) = x^2 + bx + c$, проходящей через выбранные три узла интерполяции-экстраполяции $F(x)$. Далее аналитически вычисляем положение экстремума $\bar{x}_m = -b/2c$.

4. Проверяем выполнение условия $|\bar{x}_m - x_1| < \varepsilon$. Если оно не выполняется, задаем $x_1 = \bar{x}_m$ и идем к п.1. В противном случае считаем \bar{x}_m найденным с заданной точностью ε , вычисляем $F(x_m)$ и останавливаем счет.

Метод координатного спуска

многомерной оптимизации функций заключается в поочередном поиске минимума по координате x_1 , затем x_2 и т.д. Поиск ведется с одинаковым шагом, который уменьшается после нахождения всех значений $\bar{x}_{1m}, \bar{x}_{2m}, \dots, \bar{x}_{nm}$. Таким образом, алгоритм реализации этого метода подобен алгоритму метода поразрядного приближения и лишь дополняется циклом задания переменных x_1, x_2, \dots, x_n , внутри которого оценивается погрешность нахождения x_{im} для каждой переменной. В заключение приведем пример программы минимизации функции N переменных методом координатного спуска.

```

program MINIMIZATION;
label    m1,m2;
type    amas = array[1..100] of real;
var      n,i: integer;
         h,e,l,b,c: real;
         a: amas;
function func(a:amas):real;
begin
func:=exp(a[1]+a[2]+a[3])/a[1]/sqr(a[2])/sqr(a[3])/a[3];
end;
BEGIN
write ('Введите число переменных N =');
readln (n);
write ('Задайте начальный шаг поиска h =');

```

```

readln (h);
write ('Задайте точность результата E =');
readln (e);
l:=h;
for i:=1 to n do
begin
    write ('Введите нач. значения x(,i,') =');
readln (a[i]);
end;
m2: for i:=1 to n do
begin
m1:     b:=1.0E+30;
        a[i]:=a[i]+h;
        c:=b;
        b:=func(a);
        if b-c <0 then goto m1;
        h:= - h /3;
        if abs ( h ) >=abs ( l/3 ) then goto m1;
        h:=l;
end;
l:=l/9;
h:=l;
if e/9 <= l then goto m2;
write ('Fmin = ',b);
readln;
for i:=1 to n do
writeln ('X (,i,') =', a[i]);
readln;
END.

```

ЛИТЕРАТУРА

1. А.А.Самарский, А.В.Гулин. Численные методы. - М.: Наука, 1989. - 432 с.
2. Н.С.Бахвалов. Численные методы I. - М.: Наука, 1973. - 632 с.
3. А.А.Самарский. Введение в численные методы. - М.: Наука, 1982. - 272 с.
4. В.П.Дьяконов. Справочник по алгоритмам и программам на языке БЕЙСИК для персональных ЭВМ. - М.: Наука, 1989. - 240 с.
5. Н.Н.Калиткин. Численные методы. - М.: Наука, 1978. - 512 с.
6. Б.П.Демидович, И.А.Марон, Э.З.Шувалова. Численные методы анализа. - М.: Наука, 1967. - 368 с.
7. А.О.Гельфонд. Исчисление конечных разностей. - М.: Наука, 1967. - 376 с.
8. А.С.Хаусхолдер. Основы численного анализа. - М.: Изд-во иностр. лит., 1956. - 320 с.
9. Г.Джеффрис, Б.Свирлс. Методы математической физики. ч.II. - М.: Мир, 1970. - 352 с.
10. Д. Поттер. Вычислительные методы в физике. - М.: Мир, 1975. - 392 с.
11. Дж.Каллуэй. Теория энергетической зонной структуры. - М.: Мир, 1969. - 360 с.
12. С.К.Годунов. Решение систем линейных уравнений. - Новосибирск: Наука, 1980. - 177 с.

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	3
РАЗНОСТНЫЕ АППРОКСИМАЦИИ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ	3
РЕШЕНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	5
Метод простой итерации	5
Метод Ньютона	7
Модифицированный метод Ньютона	8
Метод секущих	9
Метод дихотомии	9
Метод Эйткена - Стеффенсона с ускоренной сходимостью	10
СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	11
Метод исключения Гаусса	11
Метод квадратного корня	14
Метод простой итерации	16
Метод Зейделя	17
СИСТЕМЫ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ	18
Метод релаксации	19
Метод Ньютона	19
Модифицированный метод Ньютона	20
СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ	21
Метод Эйлера-Коши	22
Метод Эйлера-Коши с итерациями	23
Метод трапеций	23
Методы Рунге-Кутта	24
<i>Метод Рунге-Кутта четвертого порядка</i>	24
<i>Метод Рунге-Кутта для дифференциального уравнения второго порядка</i>	24
<i>Метод Рунге-Кутта-Мерсона с автоматическим изменением шага интегрирования</i>	26

ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ФУНКЦИЙ	27
Интерполяционные полиномы Лагранжа и Ньютона	29
Сплайн-интерполяция	31
Интерполяция функции двух переменных	32
ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ	33
Метод прямоугольников	34
Метод трапеций	36
Методы Ньютона-Котеса	37
Метод Симпсона (парабол)	37
Метод Гаусса-Кристоффеля	38
Вычисление несобственных интегралов	39
РЕГРЕССИОННЫЙ АНАЛИЗ	40
Линейный парный регрессионный анализ	41
Гиперболическая регрессия	42
Степенная регрессия	42
Показательная регрессия	43
Экспоненциальная регрессия	43
Логарифмическая регрессия	44
Параболическая регрессия	44
Полиномиальная регрессия	44
ВЫЧИСЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ВЕКТОРОВ МАТРИЦ	46
Основные понятия	46
Трехдиагональные матрицы	47
Трехдиагональные действительные симметричные (якобиевы) матрицы специального вида	48
Приведение действительной симметричной матрицы к трехдиагональному виду	50
Вычисление собственного вектора	54
ПОИСК ЭКСТРЕМУМОВ ФУНКЦИЙ ОДНОЙ И МНОЖЕСТВА ПЕРЕМЕННЫХ	57
Метод равномерного поиска	57
Метод поразрядного приближения	58
Метод «золотого сечения»	58

Метод квадратичной интерполяции-экстраполяции	59
Метод координатного спуска	60
ЛИТЕРАТУРА	62

Анатолий Александрович **Перов**
Александр Павлович **Протогенов**

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

Учебно-методическое пособие

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Национальный исследовательский Нижегородский государственный
университет им. Н.И. Лобачевского».
603950, Нижний Новгород, пр. Гагарина, 23.