Харьковский национальный
университет имени В. Н. Каразина

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ
В ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКЕ

УЧЕБНОЕ ПОСОБИЕ

Министерство образования и науки Украины
Харьковский национальный университет имени В. Н. Каразина

В. А. Катрич, Д. В. Майборода,
С. А. Погарский, С. Л. Просвирнин

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ В ПРИКЛАДНОЙ ФИЗИКЕ

Учебное пособие для студентов физических специальностей

Харьков – 2007

УДК 683.1
ББК 32.97
А 62

*Рекомендовано решением Ученого совета Харьковского национального университета имени В.Н. Каразина,
протокол № 6 от 26.06.07*

Рецензенты:
член – корреспондент НАН Украины, доктор физико–матема–тических наук, профессор, заведующий отделом электронных СВЧ приборов Радиоастрономического института НАН Украины Д. М. Ваврив;

доктор физико–математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической радиофизики Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина Н. Н. Колчигин;

А 62 **В. А. Катрич, Д. В. Майборода, С. А. Погарский, С. Л. Просвир–нин. Численные методы в прикладной физике**: Учебное пособие для студентов физических специальностей. – Харьков: ХНУ имени В. Н. Каразина, 2007. – 154 с.

ISBN 978–966–623–480–6

В учебном пособии рассматриваются вычислительные методы, наиболее часто используемые при решении прикладных задач: методы решения задач линейной алгебры и нелинейных уравнений, методы теории приближений функций, численное дифференцирование и интегрирование, поиск экстремумов функций, решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Использование ряда методов продемонстрировано на примерах решения ряда задач численного моделирования в электродинамике.

Для студентов и аспирантов физических специальностей, применяющих вычислительные методы.
Ил. 45, табл. 36, библ. 30 назв.

ISBN 978–966–623–480–6

СОДЕРЖАНИЕ

Цель расчетов – не числа, а понимание.

Р. В. Хемминг

Из нашего девиза "Цель расчетов – не числа, а понимание" следует, что человек, который должен этого понимания достигнуть, обязан знать, как происходит вычисление. Если он не понимает, что делается, то очень маловероятно, чтобы он извлек из вычислений что–нибудь ценное. Он видит голые цифры, но их истинное значение может оказаться скрытым в вычислениях.

Р. В. Хемминг

ПРЕДИСЛОВИЕ

В связи с увеличением числа и усложнением решаемых задач на ЭВМ постоянно растут требования к поиску эффективных методов решения. Исходя из того, что предметом вычислительной математики в широком смысле являются методы приближенного решения всевозможных прикладных задач и вопросы обоснования этих методов, в пособии содержится описание основных методов решения многих широко распространенных прикладных задач, в том числе, теории погрешностей и машинной арифметики, аппроксимации функций, численного дифференцирования и интегрирования, решения уравнений и систем уравнений, минимизации функций, решения дифференциальных уравнений, вычисления значений специальных функций, обработки данных физических экспериментов.

Учебное пособие предназначено для использования в ходе выполнения вычислительной практики и предполагает как изучение основных методов вычислительной математики, так и овладение основными приемами практического программирования и работы в различных программных оболочках, что имеет важнейшее значение для подготовки квалифицированных специалистов в области прикладной физики.

Основными целями вычислительной практики являются:

- изучение особенностей основных этапов практического программирования: анализа задачи, выбора численного метода, составления алгоритма реализации метода;
- изучение методов анализа погрешности получаемых результатов;
- приобретение навыков системного анализа получаемых результатов;

- приобретение практических навыков работы с программными оболочками и системами моделирования параметров различных структур.

Практикум включает в себя цикл заданий, соответствующих 8 разделам курса «Численные методы» и 6 разделам курса «Вычислительные методы в электродинамике». В описании каждого занятия приводятся основные теоретические сведения, задание для самоподготовки и выполнения работы, изложение основных элементов методики проведения вычислений. В конце описания каждого из занятий приводятся условия контрольных примеров и контрольные вопросы.

Учебное пособие предназначено для использования студентами при внеаудиторной подготовке и во время выполнения практических заданий в учебной лаборатории.

Авторы благодарны рецензентам: члену – корреспонденту НАН Украины, доктору физико–математических наук, профессору, заведующему отделом электронных СВЧ приборов Радиоастрономического института НАН Украины Д. М. Ваврриву, доктору физико–математических наук, профессору, заведующему кафедрой теоретической радиофизики Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина Н. Н. Колчигину за ценные замечания.

ЧАСТЬ I. ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ

1. ТЕОРИЯ ПОГРЕШНОСТЕЙ И МАШИННАЯ АРИФМЕТИКА

Цель работы: изучение методов нахождения значений машинного нуля, машинной бесконечности, машинного эпсилон.

Краткие теоретические сведения

1.1. Источники и классификация погрешностей.

Источниками возникновения погрешностей численного решения задачи являются:

- неточность математического описания, в частности, неточность задания начальных данных;
- неточность численного метода решения задачи;
- конечная точность машинной арифметики.

1.2. Виды погрешностей:

- неустранимая погрешность;
- погрешность метода;
- вычислительная погрешность.

Неустранимая погрешность состоит из двух частей: а) погрешность, обусловленная погрешностью задания числовых данных, входящих в математическое описание задачи; б) погрешность, являющаяся следствием несоответствия математического описания задачи реальной действительности (погрешность математической модели).

Результирующая погрешность определяется как сумма величин всех перечисленных выше погрешностей.

Погрешность метода связана со способом решения поставленной математической задачи. Она появляется в результате замены исходной математической модели другой или конечной последовательностью других более простых (например, линейных) моделей. При создании численных методов закладывается возможность отслеживания таких погрешностей и доведения их до сколь угодно малого уровня.

Вычислительная погрешность (погрешность округлений) обусловлена необходимостью выполнения арифметических операций над числами, усеченными до количества разрядов, количество которых зависит от применяемой вычислительной техники.

Рассмотрим более подробно последний указанный тип погрешности. В ЭВМ для вещественных чисел используется двоичная система счисления и принята форма представления чисел с плавающей точкой $x = \mu \cdot 2^p$, $\mu = \pm(\gamma_1 \cdot 2^{-1} + \gamma_2 \cdot 2^{-2} + ... + \gamma_t \cdot 2^{-t})$. Здесь μ – мантисса $\gamma_1, \gamma_2, ..\gamma_t$ – двоичные цифры, причем всегда γ_1=1, p – целое число называемое двоичным порядком. Количество t цифр, которое отводится для записи мантиссы, называется разрядностью мантиссы. Диапазон представления чисел в ЭВМ ограничен конечной разрядностью мантиссы и значением числа p. Все числа, которыми оперирует ЭВМ, должны удовлетворять неравенствам: $0 < X_0 \le |x| < X_\infty$, где $X_0 = 2^{-(p_{\max}+1)}$, $X_\infty = 2^{p_{\max}}$. Все числа, по модулю превосходящие X_∞, рассматриваются как машинная бесконечность. Все числа, по модулю меньшие X_0, для ЭВМ не отличаются от нуля и рассматриваются как машинный нуль. Машинным эпсилон ε_M называется относительная точность ЭВМ, то есть граница относительной погрешности представления чисел в ЭВМ. Покажем, что $\varepsilon_M \approx 2^{-t}$. Пусть $x^* = \mu \cdot 2^p$, тогда граница абсолютной погрешности представления этого числа равна $\overline{\Delta}(x^*) \approx 2^{-t-1} \cdot 2^p$. Поскольку $\frac{1}{2} \le \mu < 1$, то величина относительной погрешности представления оценивается так

$$\overline{\delta}(x^*) \approx \frac{\overline{\Delta}(x^*)}{|x^*|} \approx \frac{2^{-t-1} \cdot 2^p}{\mu \cdot 2^p} = \frac{2^{-t-1}}{\mu} \le \frac{2^{-t-1}}{2^{-1}} = 2^{-t}.$$

Машинное эпсилон определяется разрядностью мантиссы и способом округления чисел, реализованным на конкретной ЭВМ.

Все найденные численно значения оказываются вычисленными с определенной погрешностью. Оценка величины погрешности осуществляется следующим образом. Пусть a – точное значение, a^* – приближенное значение некоторой величины. Абсолютной погрешностью приближенного значения a^* называется величина $\Delta(a^*) = |a - a^*|$. Относительной погрешностью значения a^* (при $a \ne 0$) называется величина $\delta(a^*) = \frac{\Delta(a^*)}{|a|}$.

Так как значение a, как правило, неизвестно, чаще получают оценки погрешностей вида: $|a - a^*| \le \overline{\Delta}(a^*)$; $\frac{|a - a^*|}{|a|} \le \overline{\delta}(a^*)$. Величины $\overline{\Delta}(a^*)$ и $\overline{\delta}(a^*)$ называют верхними границами (или просто границами) абсолютной и относительной погрешностей.

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

Примеры решения задач

Задача 1. Дан ряд $\sum_{n=0}^{\infty} \frac{72}{n^2 + 5n + 4}$. Найти сумму ряда S аналитически.

Вычислить значения частичных сумм ряда $S_N = \sum_{n=0}^{N} a_n$ и найти величину погрешности при значениях $N = 10,\ 10^2,\ 10^3,\ 10^4,\ 10^5$.

Аналитическое решение задачи:

$$S_N = \sum_{n=0}^{N} \frac{72}{n^2+5n+4} = \sum_{n=0}^{N} \frac{72}{(n+1)\cdot(n+4)} = 72\cdot\sum_{n=0}^{N}\frac{1}{3}\cdot\left(\frac{1}{n+1}-\frac{1}{n+4}\right) =$$

$$= 24\cdot\left(1+\frac{1}{2}+\frac{1}{3}-\frac{1}{N+2}-\frac{1}{N+3}-\frac{1}{N+4}\right),$$

$$S = \lim_{N\to\infty} S_N = 44. \qquad \text{ОТВЕТ:}\quad S = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{72}{n^2+5n+4} = 44.$$

Численное решение задачи:

Значение частичной суммы ряда	Величина абсолютной погрешности	Количество верных цифр
S(10)=38.439560443956044	d(10)=5.56	M_1=1
S(100)=43.30092694284587	d(100)=0.699	M_2=2
S(1000)=43.9282153063675	d(1000)=0.072	M_3=3
S(10000)=43.99280215930432	d(10000)=7.198*10^{-3}	M_4=4
S(100000)=43.99928002159933	d(100000)=7.2*10^{-5}	M_5=5

Задача 2. Найти значения машинной точности, машинного нуля и значения машинного эпсилон.

В каждой программной среде (оболочке) существуют определенные правила записи операторов и арифметических выражений, с помощью которых можно найти требуемые параметры.

Так, например, в операционной среде MathCad такая форма записи реализуется последовательностью операторов:

Машинная бесконечность: inf(n):=2^n
Машинный нуль: zero(m):=2^{-m}
Машинный эпсилон: eps(k):=2^{-k}
Inf(1019)=5.618*10^{306} inf(1020)=1.124*10^{307} inf(1021)=∞
Zero(1019)=1.78*10^{-307} zero(3020)=0
Res(k)=1–eps(k)
Res(47)=1.000000000000007 res(48)=1.000000000000004
Res(49)=1.000000000000002 res(50)=1.000000000000001
Res(51)=1
Eps(50)=8.88178419700125*10^{-16}

Контрольные вопросы

1. Понятие машинной арифметики. Что такое машинный нуль, бесконечность, машинный эпсилон?

2. Из каких составляющих складывается погрешность вычислений при численном решении той или иной задачи?
3. Каким образом определяется количество верных значащих цифр в получаемом результате?
4. Каким образом определяются верхняя и нижняя границы погрешностей вычислений?

Задачи и примеры для самостоятельного решения

1. Дан ряд $\sum_{n=0}^{\infty} a_n$. Найти сумму ряда аналитически. Вычислить значения частичных сумм ряда $S_N = \sum_{n=0}^{N} a_n$ и найти величину погрешности при значениях $N = 10$, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5. (Таблица 1.1).

Таблица 1.1

N	a_n	N	a_n	N	a_n
1.	$\frac{2}{n^2+5n+6}$	11	$\frac{60}{11(n^2+12n+35)}$	21	$\frac{24}{7(n^2+8n+15)}$
2	$\frac{36}{11(n^2+5n+4)}$	12	$\frac{144}{5(n^2+6n+8)}$	22	$\frac{36}{n^2+5n+4}$
3	$\frac{9}{n^2+7n+12}$	13	$\frac{36}{n^2+7n+10}$	23	$\frac{46}{n^2+5n+6}$
4	$\frac{48}{5(n^2+6n+8)}$	14	$\frac{48}{n^2+8n+15}$	24	$\frac{96}{n^2+9n+20}$
5	$\frac{48}{5(n^2+6n+5)}$	15	$\frac{20}{n^2+4n+3}$	25	$\frac{60}{n^2+6n+8}$
6	$\frac{72}{5(n^2+6n+8)}$	16	$\frac{32}{n^2+5n+6}$	26	$\frac{72}{n^2+7n+10}$
7	$\frac{24}{n^2+8n+15}$	17	$\frac{144}{n^2+18n+80}$	27	$\frac{24}{n^2+4n+3}$
8	$\frac{32}{n^2+9n+20}$	18	$\frac{24}{n^2+4n+3}$	28	$\frac{96}{n^2+8n+15}$
9	$\frac{216}{7(n^2+8n+15)}$	19	$\frac{180}{n^2+20n+99}$	29	$\frac{72}{n^2+6n+8}$
10	$\frac{84}{13(n^2+14n+48)}$	20	$\frac{112}{15(n^2+16n+63)}$	30	$\frac{12}{5(n^2+6n+8)}$

2. Дана матрица $A= \begin{pmatrix} a_{11} & \bar{a}_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$. В каждый из диагональных элементов матрицы A по очереди внести погрешность в 1%. Как изменился определитель матрицы A? Указать количество верных цифр и вычислить величину относительной погрешности определителя в каждом случае.

3. Для матрицы A (с заданными значениями) найти обратную матрицу (если это возможно). Затем в элемент a_{11} внести погрешность в 10% и снова найти обратную матрицу. Дать интерпретацию получаемого результата.

4. Найти ранг заданной матрицы A. Затем внести погрешность в 0.1%: а) в элемент a_{11}; б) во все элементы матрицы и снова найти ранг. Дать интерпретацию получаемых результатов.

5. Для матрицы A решить вопрос о существовании обратной матрицы в следующих случаях:

а) элементы матрицы заданы точно;

б) элементы матрицы заданы приближенно с относительной погрешностью 1) $\delta=\alpha\%$ и 2) $\delta=\beta\%$. Найти относительную погрешность результата.

Указание. Задача решается путем нахождения определителя соответствующей матрицы и сравнения его с нулем. В случае, когда элементы определителя заданы точно, следует вычислить определитель и правильно ответить на поставленный в задаче вопрос.

В случае, когда элементы определителя заданы приближенно с относительной погрешностью δ, ход исследования оказывается несколько иным. Пусть элементы матрицы обозначены через a_{ij}. Тогда каждый элемент матрицы a_{ij} теперь уже не равен конкретному значению, а может принимать любое значение в интервале $[\,a_{ij}(1-\delta);\ a_{ij}(1+\delta)\,]$, если $a_{ij}>0$, и в интервале значений $[\,a_{ij}(1+\delta);\ a_{ij}(1-\delta)\,]$, если $a_{ij}<0$. Множество всех возможных значений элементов матрицы представляет собой замкнутое ограниченное множество в 9–мерном пространстве. Сам определитель является непрерывной и дифференцируемой функцией 9 переменных – элементов матрицы a_{ij}. По известной теореме Вейерштрасса эта функция достигает на указанном множестве своих экстремумов *M (максимума)* и *m (минимума)*. Если отрезок $[\,m, M\,]$ не содержит точку 0, то это означает, что при всевозможных допустимых значениях элементов матрицы a_{ij} определитель не обращается в 0. Если же точка 0 принадлежит отрезку $[\,m, M\,]$, такое утверждение будет неправомерным. В этой ситуации будет иметь место неопределённость.

Нахождению значений m и M помогают следующие рассуждения. Как функция своих аргументов (элементов матрицы a_{ij}) определитель обладает таким свойством (принцип максимума): эта функция достигает своего наибольшего и наименьшего значений всегда на границе области. Более того, можно доказать, что эти значения достигаются в точках, координаты которых имеют вид $a_{ij}(1\pm\delta)$. Таких точек $2^9=512$. В каждой из них следует вычислить определитель, а затем выбрать из полученных значений самое большое и самое маленькое. Это и будут числа M и m.