Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна

ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ В ПРИКЛАДНІЙ ФІЗИЦІ

НАВЧАЛЬНИЙ ПОСІБНИК

УДК 683.1
ББК 22.311в631.7
Ч-66

Рецензенти:

член-кореспондент НАН України, доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу електронних НВЧ приладів Радіоастрономічного інституту НАН України **Д. М. Ваврив**;
доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач відділу радіофізичної інтроскопії Інституту радіофізики і електроніки імені О. Я. Усикова НАН України **С. О. Масалов;**
доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри теоретичної радіофізики Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна **М. М. Колчигін.**

Рекомендовано Міністерством освіти і науки України
як навчальний посібник для студентів вищих навчальних закладів
(лист № 1/11-1152 від 23.02.2010 р.)

Ч-66 **Чисельні** методи в прикладній фізиці : навч. посіб. / [В. О. Катрич, Д. В. Майборода, С. О. Погарський, С. Л. Просвірнін.] – Х. : ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2011. – 172 с.

ISBN 978-966-623-672-5

У навчальному посібнику розглядаються обчислювальні методи, які достатньо часто використовуються при розв'язанні прикладних задач: методи розв'язання задач лінійної алгебри та нелінійних рівнянь, методи теорії наближень функцій, чисельне диференціювання й інтегрування, пошук екстремумів функцій, розв'язання звичайних диференціальних рівнянь. Використання цих методів продемонстровано на прикладах розв'язку низки задач чисельного моделювання в електродинаміці.

Для студентів і аспірантів фізичних спеціальностей, які застосовують обчислювальні методи.

Іл. 46, табл. 38, бібл. 30 назв.

ISBN 978-966-623-672-5

ЗМІСТ

Мета розрахунків – не числа, а розуміння.

Р. В. Хеммінг

Із нашого гасла «Мета розрахунків – не числа, а розуміння», владаємо: людина, яка повинна досягти розуміння, зобов'язана знати, яким чином відбуваються обчислення. Якщо вона не розуміє ходу дій, то є малоймовірним, щоб вона отримує з обчислень щось цінне. Вона буде бачити голі цифри, але їхнє дійсне значення може виявитися схованим в ході обчисленнях.

Р. В. Хеммінг

ПЕРЕДМОВА

У зв'язку зі збільшенням кількості а також їх ускладнення розв'язуваних задач на ЕОМ постійно зростають вимоги до пошуку ефективних методів розв’язку. Виходячи з того, що предметом обчислювальної математики у широкому розумінні є методи наближеного розв’язку всіляких прикладних задач і питання обґрунтування цих методів, у посібнику міститься опис основних методів розв’язку багатьох широко розповсюджених прикладних задач, у тому числі, апроксимації функцій, чисельного диференціювання та інтегрування, розв’язку рівнянь і систем рівнянь, мінімізації функцій, розв'язку диференціальних рівнянь, обчислення значень спеціальних функцій, обробки даних фізичних експериментів тощо.

Навички виконання реальних обчислень можуть бути досягнуті у процесі виконання обчислювальної практики.

Навчальний посібник призначений для використання подчас виконання обчислювальної практики і передбачає як вивчення основних методів обчислювальної математики, так і оволодіння основними прийомами практичного програмування та роботи в різних програмних оболонках, що має найважливіше значення для підготовки кваліфікованих фахівців у галузі прикладної фізики.

У зв'язку з цим необхідно вказати на основні цілі обчислювальної практики:

- вивчення особливостей основних етапів практичного програмування: аналізу задачі, вибору чисельного методу, складання алгоритму реалізації методу;
- вивчення методів аналізу похибки одержаних результатів;
- набуття навичок системного аналізу одержаних результатів;
- набуття практичних навичок роботи з програмними оболонками та системами моделювання параметрів різних структур.

У навчальному посібнику розглянуті не всі відомі чисельні методи, а лише ті, які найбільше використовуються фізиками (причому, не з числа найскладніших), стосовно задач, математичні аспекти яких уже неодноразово були розглянуті. В посібнику не розглядались суто математичні задачі: математичне обґрунтування методів зі строгими визначеннями та доказами усіх теорем про існування та єдинності одержуваних розв'язків. За винятком окремих випадків не розглядались питання точності одержаних розв'язків, тому що існує безліч оцінок з приводу точності будь-якого з методів. Увагу читачів було сконцентровано на технологіях використання тих чи інших методів.

Посібник містить у собі цикл завдань, що відповідають 8 розділам курсу «Чисельні методи», 6 розділам курсу «Обчислювальні методи в електро-динаміці» і 5 розділам курсу «Автоматизоване моделювання параметрів пристроїв на НВЧ та КВЧ». В описі кожного заняття наводяться основні теоретичні відомості, завдання для самопідготовки та виконання роботи, виклад основних елементів методик проведення обчислень. Наприкінці опису кожного із занять приводяться умови контрольних прикладів і контрольні питання.

Навчальний посібник призначений для використання студентами під час виконання практичних задань у навчальній лабораторії та позаудиторній підготовці.

Автори вдячні рецензентам: члену-кореспондентові НАН України, докторові фізико-математичних наук, професору, завідувачу відділом електронних НВЧ приладів Радіоастрономічного інституту НАН України Д. М. Вавриву, докторові фізико-математичних наук, професору, завідувачу відділом радіофізичної інтроскопії С. О. Масалову, докторові фізико-математичних наук, професору, завідувачу кафедрою теоретичної радіофізики Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна М. М. Колчигіну за цінні зауваження.

ЧАСТИНА І. ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ

1. ТЕОРІЯ ПОХИБОК І МАШИННА АРИФМЕТИКА

Мета роботи: вивчення методів знаходження значень машинного нуля, машинної нескінченності, машинного епсилон та оцінки похибки чисельного розв’язку задачи.

Короткі теоретичні відомості

1.1. Джерела і класифікація похибок.

Джерелами виникнення похибок чисельного розв’язку задачі є:

- неточність математичного опису, зокрема, неточність задання початкових даних;
- неточність чисельного методу розв’язку задачі;
- скінченна точність машинної арифметики.

1.2. Види похибок:

- неусувна похибка;
- похибка методу;
- обчислювальна похибка.

Неусувна похибка складається з двох частин: а) похибки, яка обумовлена похибкою задання чисельних даних, що входять до математичного опису задачі; б) похибки, що є наслідком невідповідності математичного опису задачі реальній дійсності (похибка математичної моделі).

Результуюча похибка визначається як сума величин усіх перерахованих вище похибок.

Похибка методу позв’язана зі способом розв’язку поставленої математичної задачі. Вона з'являється в результаті заміни вихідної математичної моделі іншою або кінцевою послідовністю інших більш простих (наприклад, лінійних) моделей. При реалізації чисельних методів з'являється можливість відстеження таких похибок і доведення їх до як завгодно малого рівня.

Обчислювальна похибка (похибка округлень) обумовлена необхідністю виконання арифметичних операцій над числами, усіченими до кількості розрядів, кількість яких залежить від застосованої обчислювальної техніки.

Розглянемо докладніше останній зазначений тип похибки. В ЕОМ для речовинних чисел використається двійкова система числення та прийнята форма подання чисел із плаваючою точкою $x = \pm\mu \cdot 2^p$, $\mu = \gamma_1 \cdot 2^{-1} + \gamma_2 \cdot 2^{-2} + ... + \gamma_t \cdot 2^{-t}$. Тут μ – мантиса $\gamma_1, \gamma_2, .. \gamma_t$ – двійкові цифри, причому завжди γ_1=1, p – ціле число, яке є двійковим порядком. Кількість t цифр, що приділяється для запису мантиси, називається розрядністю мантиси. Діапазон подання чисел в ЕОМ є обмеженим кінцевою розрядністю мантиси і значенням числа *p*. Усі числа, якими оперує ЕОМ, повинні задовольняти нерівностям: $0 < X_0 \le |x| < X_\infty$, де $X_0 = 2^{-(p_{\max}+1)}$, $X_\infty = 2^{p_{\max}}$. Усі числа, які за модулем переважають X_∞, розглядаються як машинна нескінченність. Усі числа, які за модулем менші X_0, для ЕОМ не відрізняються від нуля і розглядаються як машинний нуль. Машинним епсилон ε_M називається відносна точність ЕОМ, тобто границя відносної похибки зображення чисел в ЕОМ. Покажемо, що $\varepsilon_M \approx 2^{-t}$. Нехай $x^* = \mu \cdot 2^p$, тоді границя абсолютної похибки представлення цього числа дорівнює $\overline{\Delta}(x^*) \approx 2^{-t-1} \cdot 2^p$. Оскільки $0 \le \mu \le 1$, тоді величина відносної похибки представлення оцінюється як

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

Машинне епсилон визначається розрядністю мантиси та способом округлення чисел, реалізованим на конкретній ЕОМ.

Усі чисельно знайдені значення виявляються обчисленими з певною похибкою. Оцінка величини похибки здійснюється у такий спосіб. Нехай a – точне значення, a^* – наближене значення деякої величини. Абсолютною похибкою наближеного значення a^* називається величина $\Delta(a^*) = \left|a - a^*\right|$. Відносною похибкою значення a^* (при $a \neq 0$) називається величина $\delta(a^*) = \dfrac{\Delta(a^*)}{|a|}$. Оскільки значення a, як правило, невідомо, частіше одержують оцінки похибки вигляду: $|a - a^*| \leq \overline{\Delta}(a^*)$; $\dfrac{|a - a^*|}{|a|} \leq \overline{\delta}(a^*)$. Величини $\overline{\Delta}(a^*)$ і $\overline{\delta}(a^*)$ називають верхніми границями (або просто границями) абсолютної та відносної похибки.

Значущу цифру числа a^* називають вірною, якщо абсолютна похибка числа не перевершує одиниці розряду, що відповідає цій цифрі.

Приклади розв'язку задач

Задача 1. Дано ряд $\sum\limits_{n=0}^{\infty} \dfrac{72}{n^2 + 5n + 4}$. Знайти суму ряду S аналітично. Обчислити значення часткових сум ряду $S_N = \sum\limits_{n=0}^{N} a_n$ і знайти величину похибки при значеннях $N = 10$, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5.

Аналітичний розв'язок задачі:

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

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

$S = \lim\limits_{N \to \infty} S_N = 44$. ВІДПОВІДЬ: $S = \sum\limits_{n=0}^{\infty} \dfrac{72}{n^2 + 5n + 4} = 44$.

Чисельний розв'язок задачі:

Значення часткової суми ряду	Величина абсолютної похибки	Кількість вірних цифр
S(10) =38.439560443956044	d(10) =5.56	1
S(100)=43.30092694284587	d(100)=0.699	2
S(1000)=43.9282153063675	d(1000)=0.072	3
S(10000)=43.99280215930432	d(10000)=$7.198*10^{-3}$	4
S(100000)=43.99928002159933	d(100000)=$7.2*10^{-5}$	5

Задача 2. Знайти значення машинної точності, машинного нуля та значення машинного епсилон.

У кожному програмному середовищі (оболонці) існують певні оператори і арифметичні вирази, за допомогою яких можна знайти необхідні параметри.

Так, наприклад, в операційному середовищі MathCad ці значення можна знайти за реалізацією послідовності операторів:

Машинна нескінченність: inf(n):=2^n

Машинний нуль: zero(m):=2^{-m}

Машинний 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) =$8.88178419700125*10^{-16}$

Контрольні запитання

1. Поняття машинної арифметики. Що таке машинний нуль, нескінченність, машинний епсилон?
2. З яких складових складається похибка обчислень при чисельному розв'язоку тієї чи іншої задачі?
3. Яким чином визначається кількість вірних значущих цифр в одержуваному результаті?
4. Яким чином визначаються верхня та нижня границі похибки обчислень?

Задачі та приклади для самостійного розв'вязку

1. Дано ряд $\sum_{n=0}^{\infty} a_n$. Знайти суму ряду аналітично. Обчислити значення часткових сум ряду $S_N = \sum_{n=0}^{N} a_n$ та знайти величину похибки при значеннях $N = 10$, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5. (Таблиця 1.1).

Таблиця 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. Дано матрицю $A=\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}$. У кожний з діагональних елементів матриці A по черзі внести похибку в 1%. Як змінився визначник матриці A? Вказати кількість вірних цифр і обчислити величину відносної похибки визначника у кожному випадку.

3. Для матриці A (із заданими значеннями елементів) знайти обернену матрицю (якщо це можливо). Потім в елемент a_{11} внести похибку в 10% і знову знайти обернену матрицю. Дати інтерпретацію одержаному результату.

4. Знайти ранг заданої матриці A. Потім внести похибку в 0.1%: а) в елемент a_{11}; б) в усі елементи матриці та знову знайти ранг. Дати інтерпретацію одержаним результатам.

5. Для матриці A вирішити питання існування оберненої матриці в таких випадках:

а) елементи матриці задані точно; б) елементи матриці задані приблизно з відносною похибкою 1) δ=α% і 2) δ= β%. Знайти відносну похибку результату.

Вказівка. Задача розв'язується шляхом знаходження визначника відповідної матриці та порівняння його з нулем. У випадку, коли елементи визначника задані точно, варто обчислити визначник і відповісти на поставлене у задачі питання.

У випадку, коли елементи визначника задані приблизно з відносною похибкою δ, хід дослідження виявляється іншим. Нехай елементи матриці позначені через a_{ij}. Тоді кожний елемент матриці a_{ij} тепер уже не дорівнює конкретному значенню, а може приймати будь-яке значення в інтервалі $[a_{ij}\ (1 - \delta);\ a_{ij}(1 + \delta)]$, якщо $a_{ij} > 0$, і в інтервалі значень $[a_{ij}\ (1 + \delta);\ a_{ij}(1 - \delta)]$, якщо $a_{ij} < 0$. Множина всіх можливих значень елементів матриці є замкнутою обмеженою множиною в 9-мірному просторі. Сам визначник є безперервною і диференційованою функцією 9 змінних елементів матриці a_{ij}. За відомою теоремою Вейерштраса ця функція досягає на зазначеній множині своїх екстремумів *M (максимуму)* і *m (мінімуму)*. Якщо відрізок $[m, M]$ не містить значення 0, то це означає, що при всіляких припустимих значеннях елементів матриці a_{ij} визначник не перетворюється на 0. Якщо ж значення 0 належить відрізку $[m, M]$, таке твердження буде неправомірним. У цій ситуації буде мати місце невизначеність.

Знаходженню значень m і M допомагають такі міркування. Як функція своїх аргументів (елементів матриці a_{ij}) визначник має таку властивість (принцип максимуму): ця функція досягає свого найбільшого та найменшого значень завжди на границі області. Більше того, можна довести, що ці значення досягаються в точках, координати яких мають вигляд $a_{ij}(1 \pm \delta)$. Таких точок є $2^9 = 512$. У кожній з них варто обчислити визначник, а потім вибрати з отриманих значень найбільше й найменьше. Це і будуть числа M та m.